Friedrich-Schiller-Universität Jena
Physikalisch-Astronomische Fakultät
Theoretisch-Physikalisches Institut

seit 1558

Weltlinien-Monte-Carlo-Methode für fermionische Fluktuationen in starken Feldern

Masterarbeit

eingereicht von: Christoph Bösel
geb. am: 08.09.1987 in Erfurt

1. Gutachter: Prof. Dr. Holger Gies
2. Gutachter: Dr. Felix Karbstein

Tag der Verleihung:

Inhaltsverzeichnis

1 Einleitung **5**

2 Einführung in den Weltlinienformalismus **7**
2.1 Effektive Wirkung der Spinor QED auf Ein-Loop-Niveau 7
2.2 Weltliniendarstellung der Effektiven Wirkung 9
2.3 Spinorielle Quantenelektrodynamik 10
2.4 Renormierung 12
2.5 Beispiel 1: Effektive Lagrangedichte für sinusförmig variierendes B-Feld 13
2.6 Beispiel 2: Effektive Lagrangedichte für lokalisiertes, linear anwachsendes B-Feld . . 17
2.7 Fermionischer Wilson-Loop-Erwartungswert 20

3 Chirales Kondensat **25**
3.1 2+1 dimensionale Formulierung der QED 25
3.2 Chirales Kondensat - Analytische Berechnung 27
3.2.1 Schwellengleichung 27
3.2.2 Pseudo-Magnetfeld in Graphen 30
3.2.3 Sinusförmiges B-Feld 33
3.2.4 Lokalisiertes B-Feld 34
3.3 Chirales Kondensat - Numerische Berechnung 40
3.3.1 Weltliniendarstellung 40
3.3.2 Numerische Bestimmung des chiralen Kondensats 41
3.3.3 Anwendungsbeispiel: Magnetische Katalyse in inhomogenen Feldern im NJL Model 45
3.4 Chirales Kondensat in Graphen 47

4 Zusammenfassung und Ausblick **50**

A Konventionen **52**

B Integrale **52**
B.1 Chirales Kondensat 1 52
B.2 Chirales Kondensat 2 53

C Spinfaktor **55**

D Diagonalform **57**

E 2+1 dimensionale QED in Graphen **58**

1 Einleitung

Die Entwicklung der relativistischen Form der Quantenfeldtheorie durch Paul Dirac [8, 9] und die damit einhergehende Möglichkeit nichtlinearer elektrodynamischer Effekte, wie z.B. Photon-Photon-Streuung, Paarproduktion im Vakuum ect. inspirierte Werner Heisenberg und Hans Euler Mitte der 30er Jahre des zwanzigsten Jahrhunderts zur Berechnung nichtlinearer Korrekturen zu den Maxwellgleichungen [14]. Diese manifestierten sich 1936 in Form der Heisenberg-Euler Effektiven Wirkung [41], welche kurze Zeit später von Victor Weisskopf auf alternativem Wege reproduziert werden konnte [58] und als Modifikation der klassischen Wirkung der Elektrodynamik für ein uniformes elektromagnetischen Feld zu verstehen ist.
Angetrieben durch Richard Feynman [16] und Julian Schwinger [53] entwickelte sich Anfang der 1950er Jahre ein neuer Zugang zur Berechnung nichtlinearer elektrodynamischer Effekte in Form des Weltlinienformalismus. Mit der Intention eichinvariante Resultate durch Lösungsmethoden, welche nur eichinvariante Größen beinhalten, zu produzieren, gelang es Schwinger 1951 in seiner Veröffentlichung „On Gauge Invariance and Vacuum Polarization“ [53] die Berechnung der effektiven Lagrangedichte auf die Integration über einen vom Koordinatensystem sowie der Eichung unabhängigen Parameter - dem Eigenzeitparameter - zurückzuführen [53]. Dadurch gelang es Schwinger nicht nur Feynmans Weltliniendarstellung der effektiven Wirkung für Skalarfelder sowie die Ergebnisse Heisenbergs und Eulers zur effektiven Wirkung zu reproduzieren. Zudem boten sich neue Möglichkeiten des Studiums quantenelektrodynamischer Effekte in Hintergrundfeldern.
Nachdem der Weltlinienformalismus eine zeitlang eher unbeachtet blieb, erlebte er Anfang der 90er Jahre angetrieben durch die Untersuchung der Quantenfeldtheorie als Grenzfall der Stringtheorie [4, 56] einen erneuten Aufschwung. Der Weltlinienformalismus diente damit Anfang des neuen Jahrtausends als Grundlage für die in der vorliegenden Masterarbeit verwendete Weltliniennumerik [23, 22]. Diese basiert darauf, dass spezielle in der Weltlinienformulierung Schwingers auftretende Operatoren analog zum Zeitentwicklungsoperator der Quantenmechanik interpretiert und somit als gewöhnliche eindimensionale Pfadintegrale geschrieben werden können, welche anschließend mittels der Anwendung von Monte-Carlo-Methoden gelöst werden.
Die Weltliniennumerik zeigte dabei zahlreiche Vorteile gegenüber anderen Methoden zur Untersuchung inhomogener elektromagnetischer Felder wie der Ableitungsentwicklung [39, 40]. So beschränken sich weltliniennumerische Methoden nicht nur auf schwache Abweichungen von konstanten, nichtlokalisierten Feldern, sondern sind unabhängig von der jeweils gegebenen Feldkonfiguration. Des Weiteren bietet der Formalismus gegenüber Gitterfeldtheorien neben der einfachen Implementationsmöglichkeit den Vorteil, dass nur der Eigenzeitparameter diskretisiert wird, nicht jedoch die Raumzeit. Damit werden die mit der Raumzeitdiskretisierung einhergehenden Probleme der Gitterfeldtheorie, wie das Dopplerproblem der Fermionen bzw. Brechung chiraler Symmetrien, vermieden [13].
Diese Vorteile führten dazu, dass mit Hilfe der Weltliniennumerik zahlreiche Problematiken unter anderem im Bereich Casimir-Effekt [24], Paarproduktion [43, 21], Vakuumpolarisationtensor [25, 42] oder Energie-Impuls-Tensor [51] untersucht und neuartige Phänomene entdeckt werden konnten.
Auch für große Teile der vorliegenden Arbeit, welche sich vor allem auf Untersuchungen zum chiralen Kondensat in inhomogenen Feldern konzentriert, wird die Weltliniennumerik als Grundlage dienen. Der Text wird sich dabei wie folgt gliedern.
In Kapitel 2 wird zunächst einmal der Weltlinienformalismus eingeführt. Dazu wird der Weltlinienausdruck der effektiven Wirkung auf Ein-Loop-Niveau für Spinorfelder hergeleitet und anschließend die notwendige Renormierungsprozedur durchgeführt. Darauffolgend diskutieren und demonstrieren wir am Beispiel eines sinusförmig variierenden und eines lokalisierten B-Felds durch Berechnung der effektiven Lagrangedichte den numerischen Formalismus. Dabei versuchen wir Probleme sowie

Vorteile gegenüber Standardmethoden zur Untersuchung inhomogener Magnetfelder wie der bereits erwähnten Ableitungsentwicklung herauszustellen. Danach werden wir Ansätze untersuchen, die diese Problematiken, welche die Weltliniennumerik für fermionische Felder mit sich bringt, lösen bzw. mindern sollen.
Das darauffolgende Kapitel beschäftigt sich dann mit dem chiralen Kondensat, welches ein Ordnungsparameter für die spontane chirale Symmetriebrechung ist, in inhomogenen Magnetfeldern. Dort werden wir zunächst QED_{2+1} kurz hinsichtlich ihrer Symmetrien diskutieren und anschließend eine Möglichkeit vorstellen das chirale Kodensat in $d = 2 + 1$ für eine paritätsinvariante Formulierung der Quantenelektrodynamik auf analytischem Wege zu berechnen. Diese Methode wird dann auf die Beispielpotentiale aus Kapitel 2 angewendet. Daraufhin werden wir die Weltliniendarstellung des chiralen Kondensats einführen und versuchen dieses mittels Weltliniennumerik für die Beispieleichpotentiale durch Extrapolation des spinoriellen Wilson-Loop-Erwartungswertes zu approximieren. Als Vergleichsmöglichkeit dienen dabei die analytischen Ergebnisse.
Im Hinblick auf experimentelle Untersuchungen nichtlokaler quantenfeldtheoretischer Aspekte stellt sich hierbei eine betrachtete Magnetfeldkonfiguration - das lokalisierte, linear ansteigende Magnetfeld - als besonders interessant heraus, da dieses unter anderem als Pseudomagnetfeld in Graphen durch Deformation erzeugt werden kann [32, 7]. Da bekanntlich niederenergetische Anregungen in Graphen durch masselose Dirac-Fermionen beschrieben werden [46], erscheint somit unter anderem die experimentelle Untersuchung planarer quantenelektrodynamischer Effekte in Magnetfeldern möglich. In Kapitel 3.3.3 wird als Anwendungsbeispiel in diesem Zusammenhang zunächst basierend auf den Ergebnissen der vorherigen Abschnitte die magnetische Katalyse in inhomogenen Magnetfeldern im Nambu-Jona-Lasinio Model qualitativ diskutiert und anschließend in 3.4 die Beobachtbarkeit des chiralen Kodensats in Graphen anhand von experimentellen und theoretischen Befunden erörtert.

2 Einführung in den Weltlinienformalismus

2.1 Effektive Wirkung der Spinor QED auf Ein-Loop-Niveau

Als Konsequenz aus der Einführung relativistischer Quantenfeldtheorien ergeben sich unter anderem im Falle der Quantenelektrodynamik (QED) nichtlineare Effekte, welche durch Korrekturterme zur klassischen Wirkung S_{cl} in Form einer effektiven Wirkung

$$\Gamma_{eff} = S_{cl} + \Gamma^{(1)} + \Gamma^{(2)} + ... \tag{1}$$

beschrieben werden können. Die angegebene Form der effektiven Wirkung Γ_{eff} ist hierbei im Sinne einer Entwicklung nach Ordnungen des reduzierten Planckschen Wirkungsquantums $\hbar$ zu verstehen. Da die Ordnung der Konstante $\hbar$ der Anzahl der Loops in Feynman-Diagrammen entspricht (siehe z.B. [60]), stellt der erste Term $\Gamma^{(1)}$ der Entwicklung eine Korrektur zur klassischen Wirkung auf Ein-Loop-Niveau dar. Diesen Korrekturterm wollen wir im Folgenden für die spinorielle QED berechnen. Dabei werden wir natürliche Einheiten verwenden, d.h. sowohl die Lichtgeschwindigkeit c als auch $\hbar$ werden Eins gesetzt.
Ziel ist es Prozesse zu beschreiben, bei denen Fermionen mit *äußeren* elektromagnetischen Feldern wechselwirken, was zwangsweise Prozesse auf Ein-Loop-Niveau beschreibt. Die hier verwendeten Methoden zur Herleitung der Korrektur $\Gamma^{(1)}$ [11, 52] basieren auf dem Pfadintegralzugang zur Quantenfeldtheorie. In diesem können Vakuumkorrelationsfunktionen, die zur Berechnung physikalischer Größen, wie z.B. Streuquerschnitten notwendig sind, dargestellt werden als Pfadintegral über die beteiligten Quantenfelder - hier die Spinorfelder $\overline{\psi}$ und ψ. Unter Verwendung der Konventionen aus [49] erhalten wir die Korrelationsfunktionen folglich gemäß

$$\langle\Omega|\mathcal{T}\psi(x)\overline{\psi}(y)|\Omega\rangle = \frac{1}{Z[0,0]}\frac{\delta^2 Z[\overline{\eta},\eta]}{\delta\overline{\eta}(x)\delta\eta(y)}\Big|_{\overline{\eta},\eta=0} = \frac{\delta^2 \ln(Z[\overline{\eta},\eta])}{\delta\overline{\eta}(x)\delta\eta(y)}\Big|_{\overline{\eta},\eta=0} \tag{2}$$

mit dem Vakuumzustand $|\Omega\rangle$ und dem Zeitordnungsoperator $\mathcal{T}$. Hierbei wurde das Erzeugende der Vakuumkorrelationsfunktionen für Spinorfelder $Z[\overline{\eta},\eta]$ in $d = D + 1$ Dimensionen mit den Grassmann-wertigen Quellen η und $\overline{\eta}$

$$Z[\overline{\eta},\eta] = \int \mathcal{D}\overline{\psi}\mathcal{D}\psi e^{i[S[\overline{\psi},\psi]+\int d^d y(\overline{\psi}\eta+\overline{\eta}\psi)]} = \int \mathcal{D}\overline{\psi}\mathcal{D}\psi e^{iS[\overline{\psi},\psi,\overline{\eta},\eta]} \tag{3}$$

eingeführt und für die Differentiation nach den Quellen die Linksableitung verwendet. Die Integration über die Zeit $x_0 = t$ geschieht dabei von $-\infty(1 - i\epsilon)$ bis $+\infty(1 - i\epsilon)$. Weiterhin von großer Bedeutung sind das erzeugende Funktional der verbundenen Korrelationsfunktionen $E[\overline{\eta},\eta]$, definiert durch

$$Z[\overline{\eta},\eta] = e^{-iE[\overline{\eta},\eta]} \tag{4}$$

und speziell dessen Legendretransformierte - die effektive Wirkung

$$\Gamma[\overline{\psi}_{cl},\psi_{cl}] = -E[\overline{\eta},\eta] + \int d^d y(\overline{\psi}_{cl}(y)\eta(y) + \overline{\eta}(y)\psi_{cl}(y)), \tag{5}$$

wobei die klassischen Felder $\frac{\delta E}{\delta\eta} = \overline{\psi}_{cl}$ und $\frac{\delta E}{\delta\overline{\eta}} = -\psi_{cl}$ definiert sind als die Vakuumerwartungswerte von $\overline{\psi}$ und ψ in Anwesenheit der Quellen $\overline{\eta}$ bzw. η. Die effektive Wirkung ist das erzeugende Funktional der Ein-Teilchen-Irreduziblen Korrelationsfunktionen und stellt wie bereits erwähnt eine quantenfeldtheoretische Verallgemeinerung der klassischen Wirkung $S[\overline{\psi},\psi,\overline{\eta},\eta]$ dar. So können

z.B. durch Anwendung der Funktionalableitung auf die effektive Wirkung analog zum klassischen Fall Bewegungsgleichungen für die Felder abgeleitet werden, die in diesem Fall auch sämtliche Quanteneffekte beinhalten [20]. Die effektive Wirkung dient als Ausgangspunkt der folgenden Betrachtungen. Ziel wird es dabei sein eine Darstellung für die Ein-Loop-Korrektur $\Gamma^{(1)}$ zur klassischen Wirkung zu finden um diese anschließend gemäß der von Feynman [16] bzw. Schwinger [53] eingeführten Weltliniendarstellung zu formulieren.
Zunächst einmal führen wir die euklidische Darstellung der effektiven Wirkung ein:

$$\Gamma_E(T) := -i\Gamma(-iT) = -E_E - \int_{-T}^{T} dy_{D+1} \int d^D y(\overline{\psi}_{cl}\eta + \overline{\eta}\psi_{cl}) = -E_E - \int d^d y_E(\overline{\psi}_{cl}\eta + \overline{\eta}\psi_{cl}). \quad (6)$$

Hierbei wurden die Bezeichnungen $y_{D+1} := iy_0$ sowie $E_E(T) := -iE(-iT)$ verwendet. Durch Übergang ins Euklidische wird später die Anwendbarkeit der Monte-Carlo-Methoden gewährleistet. Für (3) bzw. (4) erhalten wir darüberhinaus

$$e^{E_E} = \int \mathcal{D}\overline{\psi}\mathcal{D}\psi e^{-S_E + \int d^d y_E(\overline{\psi}\eta + \overline{\eta}\psi)}, \quad (7)$$

mit $S_E := -iS(-iT)$. Im Allgemeinen lässt sich dieses Integral nicht analytisch lösen, wir können es jedoch z.B. mittels der Methode der stationären Phase, welche für eine im Vergleich zu $\hbar$ große klassische Wirkung gültig ist, nähern. Dazu entwickeln wir das Argument der Exponentialfunktion nach den Feldern ψ und $\overline{\psi}$ in (7) am Punkt stationärer Phase $(\psi_S, \overline{\psi}_S)$. Für die euklidische Wirkung erhalten wir

$$\begin{aligned} S_E[\overline{\psi}, \psi] = S_E|_{\overline{\psi}_S, \psi_S} &+ \int d^d y_E \left(\frac{\delta S_E}{\delta \psi(y_E)}\Big|_{\overline{\psi}_S, \psi_S} \mu(y_E) + \overline{\mu}(y_E) \frac{\delta S_E}{\delta \overline{\psi}(y_E)}\Big|_{\overline{\psi}_S, \psi_S} \right) \\ &+ \int d^d y_E \int d^d z_E \; \overline{\mu}(y_E) \frac{\delta^2 S_E}{\delta \overline{\psi}(y_E)\psi(z_E)}\Big|_{\overline{\psi}_S, \psi_S} \mu(z_E), \end{aligned} \quad (8)$$

wobei wir die Abkürzung $(\mu, \overline{\mu}) = (\psi - \psi_S, \overline{\psi} - \overline{\psi}_S)$ verwendet haben. Beachten wir darüberhinaus, dass am Punkt stationärer Phase die ersten Ableitungen des Argumentes der Exponentialfunktion nach den Spinorfeldern in (7) verschwinden muss, so ergibt sich nach Einsetzen von (8) in (7):

$$e^{E_E} = e^{-S_E|_{\overline{\psi}_S, \psi_S} + \int d^d y_E (\overline{\eta}\psi_S + \overline{\psi}_S \eta)} \int \mathcal{D}\overline{\mu}\mathcal{D}\mu \left(e^{-\int d^d y_E d^d z_E \; \overline{\mu} \frac{\delta^2 S_E}{\delta \overline{\psi} \delta \psi}|_{\overline{\psi}_S, \psi_S} \mu} \right). \quad (9)$$

Dabei wurde das Maß entsprechend $(\psi, \overline{\psi}) = (\mu + \psi_S, \overline{\mu} + \overline{\psi}_S)$ transformiert. Das Integral lässt sich durch Entwicklung der Felder μ und $\overline{\mu}$ nach Eigenfunktionen von $\frac{\delta^2 S_E}{\delta \overline{\psi} \delta \psi}$ und der entsprechenden Transformation des Pfadintegralmaßes als Produkt gewöhnlicher Gaußscher Integrale schreiben und anschließend lösen. Unter Verwendung der Eigenwertgleichungen und der Orthogonalitätsrelation der Eigenfunktionen erhalten wir

$$e^{E_E} = \mathcal{C} \cdot e^{-S_E|_{\overline{\psi}_S, \psi_S} + \int d^d y_E (\overline{\eta}\psi_S + \overline{\psi}_S \eta)} \cdot Det \left[\frac{\delta^2 S_E}{\delta \overline{\psi} \delta \psi}\Big|_{\overline{\psi}_S, \psi_S} \right]. \quad (10)$$

Die Konstante $\mathcal{C}$ ist hierbei ein Resultat der angesprochenen Transformation des Pfadintegralmaßes und wird im Folgenden vernachlässigt. Signifikanter Unterschied zum Analogon des komplexen Skalarfeldes der skalaren QED ist hierbei, dass wir keine inverse Funktionaldeterminante Det^{-1} erhalten haben, was der Antikommutationseigenschaft der Grassmann-Felder geschuldet ist. Für die effektive Wirkung (6) ergibt sich nun unter Verwendung von (10)

$$\Gamma_E[\overline{\psi}_S, \psi_S] = S_E[\overline{\psi}_S, \psi_S] - \int d^d y_E \left((\overline{\psi}_S + \overline{\psi}_{cl})\eta + \overline{\eta}(\psi_S + \psi_{cl}) \right) - \ln Det \left[\frac{\delta^2 S_E}{\delta \overline{\psi} \delta \psi}\Big|_{\overline{\psi}_S, \psi_S} \right]. \quad (11)$$

Betrachten wir darüberhinaus E_E in (10) bis zur führenden Ordnung in ψ_S bzw. $\overline{\psi}_S$ so können ψ_{cl} durch

$$\psi_{cl} = -\frac{\delta E_E}{\delta \overline{\eta}} \overset{(9)}{\approx} -\psi_S + \int d^d y_E \underbrace{\left(\frac{\delta S_E}{\delta \psi_S} + \overline{\eta}\right)}_{=0} \frac{\delta \psi_S}{\delta \overline{\eta}} = -\psi_S \tag{12}$$

nähern und analog $\overline{\psi}_{cl} \approx -\overline{\psi}_S$, wobei wiederum die Stationarität an der Stelle $(\psi_S, \overline{\psi}_S)$ verwendet haben. Somit ergibt sich für die effektive Wirkung

$$\Gamma_E[\overline{\psi}_S, \psi_S] \approx \Gamma_E[\overline{\psi}_{cl}, \psi_{cl}] = S_E[\overline{\psi}_{cl}, \psi_{cl}] - \ln Det \left[\frac{\delta^2 S_E}{\delta \overline{\psi} \delta \psi}\Big|_{\overline{\psi}_{cl}, \psi_{cl}}\right]. \tag{13}$$

Also Korrektur zur klassischen Wirkung $S[\overline{\psi}_{cl}, \psi_{cl}]$ haben wir folglich auf Ein-Loop-Niveau

$$\Gamma_E^{(1)} = -\ln Det \left[\frac{\delta^2 S_E}{\delta \overline{\psi} \delta \psi}\Big|_{\overline{\psi}_{cl}, \psi_{cl}}\right] = -Tr \ln \left[\frac{\delta^2 S_E}{\delta \overline{\psi} \delta \psi}\Big|_{\overline{\psi}_{cl}, \psi_{cl}}\right] \tag{14}$$

erhalten. Im Allgemeinen lässt sich die Funktionalspur in (14) nicht analytisch bilden, da das Eigenwertspektrum des Operators bekannt sein muss. Lediglich für spezielle Konfiguration, wie z.B. einem uniformen elektromagnetischen Feld, ist eine analytische Behandlung möglich. Dieses führt auf die in der Einleitung erwähnte Heisenberg-Euler-Effektiven Wirkung [41]. Die Betrachtung von $\Gamma_E^{(1)}$ im Fall inhomogener Felder hingegen erfordert in der Regel numerische Behandlungsmethoden. Eine Methode, welche unabhängig vom zugrundeliegenden Hintergrundfeld arbeitet, ist die auf der Weltliniendarstellung der effektiven Wirkung basierende Weltliniennumerik.

2.2 Weltliniendarstellung der Effektiven Wirkung

Im Folgenden wird die Weltliniendarstellung der Ein-Loop-Korrektur der effektiven Wirkung im Fall der spinoriellen Quantenelektrodynamik formuliert, welche auf Schwinger [53] zurückgeht. Dieser führte die Berechnung der effektiven Wirkung auf einen vom Koordinatensystem und der Eichung unabhängigen Integrationsparameter zurück, dem sogenannten Eigenzeitparamter, mit der Intention die Lorentz- und Eichinvarianz der gesuchten Größen zu gewährleisten. Anstatt wie Schwinger die Greensche Funktion des Dirac Feldes als Integral über den Eigenzeitparameter zu formulieren, führen wir zunächst die Bezeichnung $H_W := \frac{\delta^2 S_E}{\delta \overline{\psi} \delta \psi}$ ein und wenden dann die Formel von Frullani

$$\ln \frac{B}{A} = \int_0^\infty dT \, \frac{e^{-AT} - e^{-BT}}{T} \tag{15}$$

auf Gleichung (14) an. Das Ergebnis lautet:

$$\Gamma_E^{(1)} = \int_0^\infty \frac{dT}{T} Tr \left(e^{-H_W T}\right). \tag{16}$$

Hierbei haben wir den feldunabhängigen Term[1] bereits vernachlässigt. Die so erhaltene Gleichung können wir noch weiter umformen. Dazu führen wir die Berechnung der Funktionalspur im Ortsraum aus und erhalten somit

$$\Gamma_E^{(1)} = \int_0^\infty \frac{dT}{T} tr_\gamma \int dx \langle x | e^{-H_W T} | x \rangle. \tag{17}$$

[1] Aufgrund der Forderung, dass die Wirkung ohne äußeres Feld verschwinden soll, beinhaltet der Logarithmus in (14) die Division durch $\frac{\delta^2 S_E}{\delta \overline{\psi} \delta \psi}\big|_{A_\mu = 0}$, also den Operator bei verschwindendem äußeren Eichpotential A_μ, welcher folglich dem Nenner in (15) entspricht.

tr_γ bezeichnet hierbei die Spur über die Diracmatrizen, wie sie im Falle der spinoriellen QED notwendig wird. Schwingers Idee war es nun $\langle x|e^{-H_W T}|x\rangle$ analog zum aus der Quantenmechanik bekannten Zeitentwicklungsoperator zu behandeln, wobei H_W hier an die Stelle des Hamiltonoperators und T an die Stelle der Zeit tritt. Diese Interpretation legt eine Formulierung des Operators als eindimensionales Pfadintegral nahe, welches die zeitliche Entwicklung eines Teilchens aus dem Zustand $|x\rangle$ zur Zeit t_1 in den Zustand $|y\rangle$ zur Zeit t_2 beschreibt:

$$U\left(x(t_1), y(t_2)\right) = \langle x(t_1)|e^{-iH}|y(t_2)\rangle = \langle x|e^{-iH(t_2-t_1)}|y\rangle = \mathcal{N}\int_{x(t_1)}^{y(t_2)} Dx(t) e^{i\int_{t_1}^{t_2} dtL}. \tag{18}$$

In unserem sind Fall (17) Anfangs- und Endpunkt offensichtlich identisch, weshalb wir über geschlossene Bahnen integrieren müssen. Für die effektive Wirkung (17) folgt somit

$$\begin{aligned}\Gamma_E^{(1)} &= \int_0^\infty \frac{dT}{T} tr_\gamma \mathcal{N} \int d^d x \int_{x(0)=x(-iT)=x} \mathcal{D}x(t) e^{i\int_0^{-iT} dtL_W} \\ &= \int_0^\infty \frac{dT}{T} tr_\gamma \mathcal{N} \int_{x(0)=x(T)} \mathcal{D}x(\tau) e^{\int_0^T d\tau L_W}.\end{aligned} \tag{19}$$

Die Berechnung der Funktionalspur in (16) konnte also auf die Berechnung eines eindimensionalen Pfadintegrals zurückgeführt werden. Mit Hilfe der Lagrangedichte der Quantenelektrodynamik können wir nun die Weltlinien-Lagrangefunktion L_W berechnen und damit Ein-Loop-Korrekturen zur klassischen Wirkung für eine gegebene elektromagnetische Feldkonfiguration berechnen. Das soll im Folgenden am Beispiel der spinoriellen Quantenelektrodynamik demonstriert werden.

2.3 Spinorielle Quantenelektrodynamik

Zur Berechnung von L_W berechnen wir zunächst $\frac{\delta^2 S_E}{\delta\overline{\psi}\delta\psi}$ für Lagrangedichte der Spinor QED in der euklidischen Formulierung

$$\mathcal{L}_E = \frac{1}{4}F_{\mu\nu}^2 + \overline{\psi} i \not{D} \psi + m\overline{\psi}\psi, \tag{20}$$

wobei $\not{D} = \gamma^\mu D_\mu = \gamma^\mu(\partial_\mu - ieA_\mu)$ ist. Damit erhalten wir unter Ausnutzung der Zyklizität der Spur, $(\gamma^5)^2 = 1$ sowie $\{\gamma^5, \gamma^\mu\} = 0$

$$\begin{aligned}\Gamma_E^{(1)} &= -Tr\ln\left[\frac{\delta^2 S_E}{\delta\overline{\psi}\delta\psi}\right] = -Tr\ln(i\not{D} - m) = -\frac{1}{2}\left(Tr\ln(i\not{D} - m) + Tr\ln(-i\not{D} - m)\right) \\ &= -\frac{1}{2}Tr\ln\left(\not{D}^2 + m^2\right) = -\frac{1}{2}Tr\ln\left(-D^2 + m^2 - \frac{ie}{2}\sigma^{\mu\nu}F_{\mu\nu}\right).\end{aligned} \tag{21}$$

Hierbei wurde im letzten Schritt die euklidische Dirac-Algebra $\{\gamma_\mu, \gamma_\nu\} = -2\delta_{\mu\nu}$, $[D_\mu, D_\nu] = -ieF_{\mu\nu}$ sowie $\sigma^{\mu\nu} = \frac{1}{2}[\gamma^\mu, \gamma^\nu]$ verwendet. Wir haben folglich den Weltlinien-Hamiltonoperator

$$H_W = -D^2 + m^2 - \frac{ie}{2}\sigma^{\mu\nu}F_{\mu\nu} \tag{22}$$

erhalten, der sich vom Analogon der skalaren QED durch den Term $-\frac{ie}{2}\sigma^{\mu\nu}F_{\mu\nu}$ unterscheidet. Nun können wir L_W aus einer Legendre-Transformation bestimmen:

$$L_W = \frac{\dot{x}^2}{4} - e\dot{x}A - m^2 + \frac{ie}{2}\sigma^{\mu\nu}F_{\mu\nu} \overset{\frac{dx}{dt} := i\frac{dx}{d\tau}}{=} -\frac{\dot{x}^2}{4} - ie\dot{x}A - m^2 + \frac{ie}{2}\sigma^{\mu\nu}F_{\mu\nu}. \tag{23}$$

Für die effektive Wirkung (19) ergibt sich demnach

$$\Gamma_E^{(1)} = \frac{1}{2}\int_0^\infty \frac{dT}{T}\mathcal{N}\int_{x(0)=x(T)} \mathcal{D}x(\tau)e^{-m^2T}e^{-\int_0^T d\tau\frac{\dot{x}^2}{4}}e^{-ie\int_0^T d\tau\dot{x}A}tr_\gamma\mathcal{P}e^{\frac{ie}{2}\int_0^T d\tau\sigma^{\mu\nu}F_{\mu\nu}}. \tag{24}$$

Wir wollen an dieser Stelle noch das Analogon für den Fall der skalaren QED angeben

$$\Gamma_E^{(1)} = -\int_0^\infty \frac{dT}{T}\mathcal{N}\int_{x(0)=x(T)} \mathcal{D}x(\tau)e^{-m^2T}e^{-\int_0^T d\tau\frac{\dot{x}^2}{4}}e^{-ie\int_0^T d\tau\dot{x}A}. \tag{25}$$

Diese Form der effektiven Wirkung wurde erstmals von Feynman entdeckt [16]. Es ergibt sich im skalaren Fall demnach die selbe Gleichung ohne den Spinfaktor

$$tr_\gamma\mathcal{P}e^{\frac{ie}{2}\int_0^T d\tau\sigma^{\mu\nu}F_{\mu\nu}}, \tag{26}$$

und den Faktor $-\frac{1}{2}$. $\mathcal{P}$ bezeichnet hierbei die Pfadordnung, welche analog zur Zeitordnung definiert ist. Bei der Herleitung der Pfadintegraldarstellung wird diese notwendig, da Hamiltonoperatoren an verschiedenen Punkten im Magnetfeld nicht kommutieren müssen. Bei speziellen Feldkonfiguration, wie z.B. uniaxialen Magnetfeldern, ergibt sich jedoch eine besonders einfache Darstellung (siehe Anhang C).
Im Falle des Feldfreien Raumes mit verschwindendem Eichpotential $A^\mu = 0$ kann Gleichung (17) analytisch berechnet werden, wodurch die Konstante $\mathcal{N}$ durch Gleichsetzen mit (24) einfach abgelesen werden kann. Es ergibt sich

$$\mathcal{N} = \frac{1}{(4\pi T)^{\frac{d}{2}}}\frac{1}{\int_{x(0)=x(T)}\mathcal{D}x(\tau)e^{-\int_0^T d\tau\frac{\dot{x}^2}{4}}}. \tag{27}$$

Wir nehmen noch eine weitere Modifizierung in (25) vor indem wir am jeweiligen Raumpunkt über alle Loops mit dem gleichen Schwerpunkt x_{CM} integrieren

$$\int_{x(0)=x(T)}\mathcal{D}x(t) = \int d^dx\int_{x(0)=x(T)=x}\mathcal{D}x(t) = \int dx_{\mathrm{CM}}\int_{\substack{x(0)=x(T)\\ x_{\mathrm{CM}}}}\mathcal{D}x(t) \tag{28}$$

und durch die Substitution $\tau := Tt$ mit

$$x(\tau) = \sqrt{T}y(t) + x_{\mathrm{CM}} \tag{29}$$

Einheitsloops, welche durch $y(0) = y(1)$ definiert sind, einführen. Dadurch wird die numerische Berechnung der Loops vereinfacht, da die Looperzeugung T-unabhängig wird. Nach Einsetzen in (24) können wir also schreiben:

$$\Gamma_E^{(1)} = \int dx_{\mathrm{CM}}\mathcal{L}_E^{(1)} = \frac{1}{2}\frac{1}{(4\pi)^{\frac{d}{2}}}\int dx_{\mathrm{CM}}\int_0^\infty \frac{dT}{T^{\frac{d}{2}+1}}e^{-m^2T}\langle W_{Sp}\rangle \tag{30}$$

mit dem spinoriellen Wilson-Loops-Erwartungswert(WLEW)

$$\langle W_{Sp}\rangle = \frac{\int_{\substack{y(0)=y(1)\\ x_{\mathrm{CM}}}}\mathcal{D}y(t)W_{sp}e^{-\int_0^1 dt\frac{\dot{y}^2}{4}}}{\int_{\substack{y(0)=y(1)\\ x_{\mathrm{CM}}}}\mathcal{D}y(t)e^{-\int_0^1 dt\frac{\dot{y}^2}{4}}} \tag{31}$$

und dem spinoriellen Wilson-Loop

$$W_{Sp} = e^{-ie\sqrt{T}\int_0^1 dt\dot{y}A\left(\sqrt{T}y(t)+x_{\mathrm{CM}}\right)}tr_\gamma\mathcal{P}e^{\frac{ie}{2}\int_0^1 dt\sigma^{\mu\nu}F_{\mu\nu}}. \tag{32}$$

Damit haben wir eine Form der Ein-Loop-effektiven Wirkung erreicht, die für numerische Berechnungen mit Hilfe von Monte-Carlo-Methoden geeignet ist.
Das Vorgehen wird dabei im Allgemeinen so aussehen, dass man zunächst mit Hilfe eines geeigneten Algorithmus ein Ensemble von n_L Einheits-Loops y_I mit N Stützstellen gemäß des Gaußschen Gewichts $\exp\left(-\int_0^1 dt \frac{\dot{y}^2}{4}\right)$ erzeugt. Für ein gegebenes Eichpotential $A\left(\sqrt{T}y(t)+x_{\mathrm{CM}}\right)$ wird dann für jeden Loop W_{Sp} berechnet, über das Loopensemble gemittelt und somit der Erwartungswert (31) ermittelt:

$$\langle W_{Sp}\rangle = \frac{1}{n_L}\sum_{\{y_I\}} W_{Sp}[y_I]. \tag{33}$$

Von großer Bedeutung ist hierbei die Einführung der Einheitsloops (29). Diese erlauben es, dass für jedes T, für welches der Erwartungswert (31) berechnet wird, das selbe Loopensemble verwendet werden darf. Durch die Variation von T wird lediglich die Größe der Loops skaliert. Betrachtet man folglich einen konkreten Punkt x_{CM} im gegebenen elektromagnetischen Feld an dem der WLEW berechnet wird, kann man durch Variation von T in das Feld hineinzoomen, um damit Ultravioletttinformation zu erhalten, oder herauszoomen für Infrarotinformationen.
Der statistische Fehler der Berechnungen ergibt sich aus der Standardabweichung

$$\Delta\langle W_{Sp}\rangle = \frac{1}{\sqrt{n_L}}\sqrt{\langle W_{Sp}^2\rangle - \langle W_{Sp}\rangle^2}. \tag{34}$$

2.4 Renormierung

Betrachten wir Gleichung (30), so fällt auf, dass das Eigenzeitintegral für $T \to 0$ divergiert. Folglich muss das Integral an der unteren Integrationsgrenze durch einen UV-Cutoff regularisiert und anschließend renormiert werden. Die Renormierungsprozedur geschieht hierbei nach dem Standardverfahren [43, 11, 22]. Die Cutoff-Abhängigkeit im Eigenzeitintegral von

$$\Gamma_E^{(1)} = \frac{1}{2}\frac{1}{(4\pi)^{\frac{d}{2}}}\int dx_{\mathrm{CM}}\int_{\frac{1}{\Lambda^2}}^{\infty}\frac{dT}{T^{\frac{d}{2}+1}}e^{-m^2T}\langle W_{Sp}\rangle \tag{35}$$

lässt sich durch eine Entwicklung des WLEW für kleine T - einer Heat-Kernel-Entwicklung(HKE) - isolieren. Eine Taylor-Entwicklung von W_{Sp}, Anwendung des Wickschen Theorems auf die Korrelationsfunktionen und anschließendes Einsetzen der bekannten Propagatoren (siehe z.B. [52]) liefert[2]:

$$\frac{1}{4}\langle W_{Sp}\rangle = 1 + \frac{1}{6}T^2e^2(F_{\mu\nu}(x_{\mathrm{CM}})|_{T=0})^2 + \mathcal{O}(T^4). \tag{36}$$

In $d = 3+1$ Dimensionen reicht offensichtlich die Entwicklung bis $\mathcal{O}(T^4)$ um die Divergenz in (35) zu isolieren. Die Isolation der Divergenzen gelingt uns, indem wir die beiden Terme im Eigenzeitintegrale als Counterterme einführen, wodurch die divergenten Anteile im Integral verschwinden und der Cutoff entsprechend vernachlässigt werden kann:

$$\begin{aligned}\Gamma_E^{(1)} = &\frac{1}{8\pi^2}\int dx_{\mathrm{CM}}\int_0^{\infty}\frac{dT}{T^3}e^{-m^2T}\left(\frac{1}{4}\langle W_{Sp}\rangle - 1 - \frac{1}{6}T^2e^2F_{\mu\nu}^2\right)\\ &+\frac{1}{6}\frac{1}{8\pi^2}\int dx_{\mathrm{CM}}\int_{\frac{1}{\Lambda^2}}^{\infty}\frac{dT}{T^3}e^{-m^2T}T^2e^2F_{\mu\nu}^2.\end{aligned} \tag{37}$$

[2]Entgegen der in der Literatur üblichen Konvention führen wir hier den Faktor $\frac{1}{4}$, welcher sich mit einem Faktor 4 des Spinfaktors (26) wegkürzt, explizit mit.

Den feldunabhängigen Term im cutoffabhängigen Integral haben wir hier vernachlässigt. In den bisherigen Rechnungen wurden sämtliche Größen durch nackte Parameter ausgedrückt. Durch Lösung des cutoffabhängigen Integrals können wir diese zu Gunsten der physikalischen Paramter e_R und F_R eliminieren und damit die Cutoffabhängigkeit absorbieren. Als physikalische Forderungen an die komplette effektive Wirkung wählen wir die Coleman-Weinberg Renormierungsbedingungen [23]

$$\Gamma[F=0]=0, \qquad \frac{\delta\Gamma}{\delta(F^2)}\Big|_{F^2/e_R^2=\mu^2/2}=\frac{1}{4e_R^2(\mu)} \tag{38}$$

mit der Messskala μ. Zum einen verlangen wir also, dass die effektive Wirkung im feldfreien Fall verschwinden soll, was durch das Abziehen des ersten Terms der HKE (36) vom WLEW erreicht wird, und zum anderen, dass die Kopplung auf einer Messskala μ experimentell festgelegt wird. Für die effektive Wirkung erhalten wir letztendlich

$$\begin{aligned}\Gamma = S_{cl}+\Gamma_E^{(1)} &= \int dx_{\mathrm{CM}}\left(\frac{1}{4}e_R^2F_R^2+\overline{\psi}i\not{D}\psi+m\overline{\psi}\psi\right)\\ &+\frac{1}{8\pi^2}\int dx_{\mathrm{CM}}\int_0^\infty\frac{dT}{T^3}e^{-m^2T}\left(\frac{1}{4}\langle W_{Sp}\rangle-1-\frac{1}{6}T^2e_R^2F_R^2\right),\end{aligned} \tag{39}$$

mit den renormierten Größen

$$F_R^2=\left[1-\frac{e^2}{12\pi^2}\left(\gamma_E-\ln\left(\frac{\Lambda^2}{\mu^2}\right)\right)\right]F^2, \quad e_R^2=\left[1-\frac{e^2}{12\pi^2}\left(\gamma_E-\ln\left(\frac{\Lambda^2}{\mu^2}\right)\right)\right]^{-1}e^2. \tag{40}$$

Hierbei bezeichnet γ_E die Euler Konstanten, welche sich aus der Integration des cutoffabhängigen Terms in (37) ergibt. Somit bleibt das Produkt aus Feldstärke und Kopplung invariant. Es sei noch erwähnt, dass eine Massenrenomierung nicht erforderlich war, die bei der Approximation der effektiven Wirkung mit Hilfe höherer Loopordnungen notwendig wird [11]. Als entscheidende Größe, die es also zu berechnen gilt, haben wir nun

$$\Gamma_E^{(1)}=\frac{1}{8\pi^2}\int_0^\infty\frac{dT}{T^3}e^{-m^2T}\int dx_{\mathrm{CM}}\left(\frac{1}{4}\langle W_{Sp}\rangle-1-\frac{1}{6}T^2e^2F_{\mu\nu}^2\right) \tag{41}$$

erhalten, welche nun aufgrund der Einführung der Counterterme sowie der renormierten Größen e_R und F_R UV endlich ist.

2.5 Beispiel 1: Effektive Lagrangedichte für sinusförmig variierendes B-Feld

In diesem Kapitel soll der numerische Formalismus an einem konkreten Beispiel demonstriert werden. Dazu berechnen wir die effektive Lagrangedichte für ein sinusförmig moduliertes konstantes B-Feld. Dazu verwenden wir das Eichpotential

$$A_2(x_3)=-\overline{B}x_3-B_1\frac{\lambda_B}{2\pi}\sin\left(\frac{2\pi}{\lambda_B}x_3\right), \tag{42}$$

welches bereits hinsichtlich Vakuumpolarisationseffekten in der skalaren QED [25] mit Hilfe der Weltliniennumerik untersucht wurde. Für den Grenzfall großer Wellenlängen geht das zugehörige Magnetfeld

$$B=\overline{B}+B_1\cos\left(\frac{2\pi}{\lambda_B}\left(\sqrt{T}y_3(t)+x_{\mathrm{CM}}\right)\right) \tag{43}$$

am jeweiligen Loopensemble-Schwerpunkt $x_{\mathrm{CM}} = k \cdot \lambda_B$ mit $k \in [0,1]$ in den lokal konstanten B-Feld Fall über. Da der WLEW für ein konstantes B-Feld, z.B. durch explizite Berechnung der Eigenwerte des Weltlinien-Hamiltonoperators, analytisch bestimmt werden kann [43]:

$$\langle W_{Sp}\rangle = \langle W_{Sk}\rangle \cdot 4 \cdot \cosh(eBT) = \frac{eBT}{\sinh(eBT)} \cdot 4 \cdot \cosh(eBT) = 4eBT \cdot \coth(eBT), \tag{44}$$

wobei mit $\langle W_{Sk}\rangle$ der WLEW des Skalarfeldes bezeichnet wird, können die numerischen Ergebnisse zum einen hinsichtlich des Grenzfalls $\lambda_B \to \infty$ überprüft und zum anderen der Fall eines konstanten B-Feldes mitdiskutiert werden.
Es gilt also zunächst einmal gemäß (31) den WLEW für dieses Eichpotential zu berechnen. Wir erhalten

$$\begin{aligned}
\langle W_{Sp}\rangle &= \Big\langle e^{-ie\sqrt{T}\int_0^1 dt\dot{y}_\mu A^\mu(\sqrt{T}y(t)+x_{\mathrm{CM}})} tr_\gamma \mathcal{P} e^{\frac{ie}{2}\int_0^1 dt\sigma^{\mu\nu}F_{\mu\nu}(y(t)\sqrt{T}+x_{\mathrm{CM}})}\Big\rangle \\
&= \Big\langle \cos\Big(e\sqrt{T}\int_0^1 dt\dot{y}_\mu A^\mu\left(\sqrt{T}y(t)+x_{\mathrm{CM}}\right)\Big)\, tr_\gamma \mathcal{P} e^{\frac{ie}{2}\int_0^1 dt\sigma^{\mu\nu}F_{\mu\nu}(y(t)\sqrt{T}+x_{\mathrm{CM}})}\Big\rangle \\
&\overset{(C.37)}{=} 4 \cdot \Big\langle \cos\Big(e\overline{B}T\Big[\int_0^1 dt\dot{y}_3 y_2\Big(1+\frac{B_1}{\overline{B}}\cdot\cos\Big(\frac{2\pi}{\lambda_B}\Big[\sqrt{T}y_3+x_{\mathrm{CM}}\Big]\Big)\Big)\Big]\Big) \\
&\qquad \cdot \cosh\Big(e\overline{B}T\Big[\int_0^1 dt\Big(1+\frac{B_1}{\overline{B}}\cdot\cos\Big(\frac{2\pi}{\lambda_B}\Big[\sqrt{T}y_3+x_{\mathrm{CM}}\Big]\Big)\Big)\Big]\Big)\Big\rangle.
\end{aligned} \tag{45}$$

Von der ersten zur zweiten Zeile haben wir ausgenutzt, dass der Gewichtungsfaktor des Pfadintegrals invariant ist unter der Transformation $y(t) \to y(1-t)$ und somit der *Sinus*-Anteil der komplexen Exponentialfunktion bei der Integration wegfällt. Im folgenden Schritt wurde das Eichpotential sowie der zugehörige Spinfaktor(siehe Anhang C) eingesetzt und zudem eine partielle Integration nach t unter Ausnutzung von $y(0) = y(1)$ vorgenommen. Die partielle Integration vereinfacht hierbei die numerischen Realisierbarkeit der Betrachtung des Grenzfalls großer Wellenlangen λ_B.
Für die numerischen Berechnungen muss nach Gleichung (33) zunächst ein Ensemble von n_L Einheitsloops gemäß dem Gewichtungsfaktor

$$P[\{y_{i,k}\}] = \delta(y_{i,1}+...+y_{i,N}) \cdot \exp\left[-\frac{N}{4}\left\{\sum_{k=1}^{N}(y_{i,k}-y_{i,k-1})^2\right\}\right] \tag{46}$$

erzeugt werden, wobei die Deltadistribution die Geschlossenheit der Loops zum Ausdruck bringt und der Index i die jeweilige Dimension kennzeichnet. Ein Algorithmus, der dies bewerkstelligt, ist z.B. der in der vorliegenden Arbeit verwendete vloop-Algorithmus [24]. Dieser nutzt aus, dass die quadratische Form im Exponenten von (46) durch geeignete Substitutionen auf Diagonalform gebracht werden kann. Die entsehenden Gaußverteilungen können daraufhin mittels Box-Muller-Verfahren simuliert und die gaußverteilten Zufallszahlen anschließend zur Berechnung der Looppunkte verwendet werden. Zur Anwendung der diskretisierten Loops mit N Stützstellen ist dann eine Diskretisierung der t-Integration in Gleichung (45) erforderlich. Wir verwenden hier die Stufendiskretisierung und stellen den Wilson Loop somit dar als:

$$\begin{aligned}
W_{Sp} = 4 \cdot \cos\Big(e\overline{B}T\Big[\sum_{k=1}^{N}\frac{1}{2}\left(y_{3,k}-y_{3,k-1}\right)\left(y_{2,k}+y_{2,k-1}\right) \\
\cdot\Big(1+c\cdot\frac{1}{2}\Big\{\cos\Big(\frac{2\pi}{\lambda_B}\Big[\sqrt{T}y_{3,k}+x_{\mathrm{CM}}\Big]\Big)+\cos\Big(\frac{2\pi}{\lambda_B}\Big[\sqrt{T}y_{3,k-1}+x_{\mathrm{CM}}\Big]\Big)\Big\}\Big)\Big]\Big) \\
\cdot\cosh\Big(e\overline{B}T\Big[\sum_{k=1}^{N}\Big(1+\frac{B_1}{\overline{B}}\cdot\cos\Big(\frac{2\pi}{\lambda_B}\Big[\sqrt{T}y_{3,k-1}+x_{\mathrm{CM}}\Big]\Big)\Big)\Big]\Big).
\end{aligned} \tag{47}$$

Durch Mittelung über sämtliche Loops ergibt sich gemäß Gleichung (33) der in Abb. 1 dargestellte WLEW ohne bzw. mit Spinfaktor, aufgetragen über dem Eigenzeitparameter für vier verschiedene Wellenlängen im Maximum $x_{\mathrm{CM}} = 0$ des B-Feldes. Die Stützstellen bzw. Loopzahl wurde dabei so gewählt, dass ein guter Kompromiss aus einem möglichst kleinen systemtatischen bzw. statistischen Fehler und einem vertretbaren zeitlichen Aufwand zur Erzeugung der Plots erzielt wurde. Der statistische Fehler wird dabei gemäß (33) durch die Anzahl der Loops n_L reguliert. Bei der Wahl der Anzahl der verwendeten Stützstellen N sollte im Allgemeinen das Verhältnis aus dem mittleren Abstand der Looppunkte und der charakteristischen Längenskala des jeweiligen inhomogenen Magnetfeldes berücksichtigt, werden um einen möglichst kleinen systematischen Fehler zu gewährleisten. Wir wählen im Folgenden Loops mit $N = 1000$ Stützstellen und Ensembles mit $n_L = 40000$ Loops. Außerdem charakterisieren wir in diesem Abschnitt das B-Feld durch $e\overline{B} = 1$ und $B_1 = 0.5 \cdot \overline{B}$.

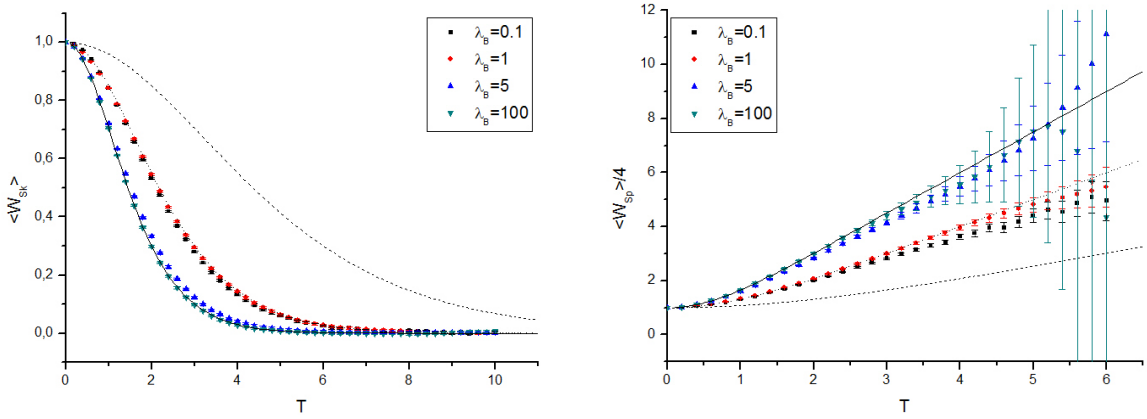

Abbildung 1: Es wurde der skalare (links) und der spinorielle WLEW (rechts) für verschiedene Wellenlängen λ_B im Maximum des Magnetfeldes $x_{\mathrm{CM}} = 0$ geplottet. Das B-Feld wird durch $e\overline{B} = 1$ und $B_1 = 0.5 \cdot \overline{B}$ charakterisiert. Die Linien kennzeichen den WLEW des lokal-konstanten B-Feldes bei $x_{\mathrm{CM}} = 0$ (durchgezogen), $x_{\mathrm{CM}} = \lambda_B/4$ (gepunktet) und $x_{\mathrm{CM}} = \lambda_B/2$ (gestrichelt).

Wie in Abb. 1 beispielhaft für $x_{\mathrm{CM}} = 0$ zu sehen ist, gehen sowohl der skalare als auch der spinorielle WLEW wie erwartet für große Wellenlängen λ_B in den lokal-konstanten B-Feld-Fall über. Für kleine Wellenlängen hingegen tendieren die WLEW im dargestellten T-Bereich zu den analytischen Werten des mittleren B-Feldes $\overline{B}$. Dies geschieht dabei unabhängig vom gewählten Loopschwerpunkt x_{CM}.
In Kap. 3.2.3 wird für das Eichpotential (42) *analytisch* gezeigt, dass das chirale Kondensat (siehe 3.1/3.2) in $d = 2 + 1$ für $\lambda_B \to 0$ in das Kondensat des mittleren B-Feldes übergeht. Da das chirale Kondensat im Weltlinienformalismus für unser Eichpotential (42) mit Hilfe des spinoriellen WLEW berechnet werden kann und sich der Wert des Kondensats aus der Asymptotik für große T des WLEW bestimmt (siehe Kap. 3.3), kann somit gefolgert werden, dass auch im Bereich großer T-Werte kleine λ_B zu einem gemittelten B-Feld-Fall führen.
In der Darstellung des spinoriellen WLEW zeigt sich zudem eine Problematik des numerischen Formalismus für fermionische Felder: der exponentielle Anstieg des Spinfaktors verstärkt die numerischen Ungenaugigkeiten, resultierend aus der Diskretisierung der Loops, die sich für große T aus der schnell variierenden Phase des skalaren WLEW ergeben. Da dieser nach (44) für die skalare

QED exponentiell mit T fällt, machen sich die Diskretisierungsprobleme im skalaren Fall nicht bemerkbar[3]. Im spinoriellen Fall jedoch hebt sich der exponentielle Abfall mit dem expontentiellen Anstieg des *Cosinushyperbolicus* auf, was zu einem linearen Anstieg des WLEW führt. Wir wollen noch anmerken, dass der Anstieg ein Resultat der Nullmoden ($E_0 = 0$) des Dirac-Operators bzw. des Weltlinien-Hamilton-Operators (22) darstellt. Diese verursachen, dass der Zeitentwicklungsoperator in (17) für $T \to \infty$ nicht exponentiell gedämpft wird für $m^2 = 0$:

$$\langle x|e^{-\not{D}T}|x\rangle = \sum_n \langle x|e^{-\not{D}T}|\psi_n\rangle\langle\psi_n|x\rangle = |\psi_0(x)|^2 + \sum_{n>1} e^{-E_n T}|\psi_n(x)|^2 \overset{T\to\infty}{\to} |\psi_0(x)|^2, \tag{48}$$

wobei hier die Eigenfunktionen ψ_n des Dirac-Operators mit den zugehörigen Eigenwerten E_n verwendet wurden.
Da die uns eigentlich interessierende physikalische Größe, die effektive Lagrangedichte

$$\mathcal{L}_E^{(1)} = \frac{1}{8\pi^2}\int_0^\infty \frac{dT}{T^3} e^{-m^2 T}\left(\frac{1}{4}\langle W_{Sp}\rangle - 1 - \frac{1}{6}T^2 e^2 F_{\mu\nu}^2\right), \tag{49}$$

welche sich für ein konstantes Magnetfeld analytisch integrieren lässt [10], durch $\exp(-m^2 T)$ für jedes T exponentiell gedämpft wird, werden die numerischen Probleme erst erheblich für Massen $m^2 \leq eB$ bzw. bei inhomogenen Feldern für $m^2 \lesssim \langle eB(x_{\mathrm{CM}})\rangle$. Dann nämlich hebt der Dämpfungsfaktor den exponentiellen Anstieg des Spinfaktors nicht mehr auf, womit eine sinnvolle numerische Aufintegration der effektiven Lagrangedichte nicht mehr möglich ist. In Kap 2.7 werden wir einen möglichen Ansatz zur Lösung bzw. Minderung dieser Problematik für spezielle Eichpotentiale testen, bzw. in Kap. 3.3 versuchen den WLEW für große T geeignet zu extrapolieren
Ein weiteres numerisches Problem auf dem Weg zur Berechnung der effektiven Lagrangdichte resultiert aus den Countertermen im Integranden von Gleichung (49): da die Divergenzen durch die Counterterme nur mit numerischer Genauigkeit weggehoben werden, verhält sich der Integrand für $T \to 0$ singulär. In einer Standardmethode zur Lösung des Problems [23] wird der Integrand unter Ausnutzung der Heat-Kernel-Entwicklung polynomial bis zu einem Wert $T = T_{Fit}$ angefittet und bis zu T_{Fit} das entsprechende Fitpolynom zu Integration genutzt:

$$\frac{1}{4}\langle W_{Sp}\rangle - 1 - \frac{1}{6}T^2 e^2 F_{\mu\nu}(x_{\mathrm{CM}})^2 = a_4 T^4 + a_6 T^6. \tag{50}$$

Ein Polynom 6.Grades zum Fitten stellt sich für das gegebene Eichpotential als besonders zweckmäßig heraus. Der Wert T_{Fit} wird dabei dynamisch so bestimmt, dass sich die aus den Fitdaten ergebende Fehlerintervallgröße, der Intervallgröße der ungefitteten Daten an der Stelle T_{Fit} angleicht. Als Resultat ergeben sich dann die in Abb. 2 sichtbaren Darstellungen des Integranden sowie der effektiven Lagrangedichte an der Stelle $x_{\mathrm{CM}} = 0$ im Magnetfeld.
Bei Betrachtung der effektiven Lagrangedichten bzw. der Eigenzeitintegranden zeigt sich für schnell variierende Felder in $d = 3 + 1$ ein Phänomen, welches unter anderem bei der Analyse der effektive Wirkung von Vortexsystemen beobachtet wurde [44]: für kleine Wellenlängen scheint der Betrag des Eigenzeitintegranden der effektiven Lagrangedichte im Bereich des Maximums stark überhöht. Der Grund für die Überhöhung stellt dabei die Dominanz des Counterterms $-\frac{1}{6}T^2 e^2 F_{\mu\nu}^2$ im Integranden dar, da er im Gegensatz zum WLEW einen negativen Beitrag zur negativen effektiven Lagrangdichte liefert. Der Counterterm stellt dabei ausschließlich einen lokalen Beitrag zur Lagrangedichte, wohingegen der WLEW aufgrund der räumlich ausgedehnten Loop-Ensembles nichtlokale

[3] Wir bedienen uns ans dieser Stelle der Darstellung des WLEW des konstanten B-Feldes wohlwissend, dass keine bekannte analytische Darstellung für unser inhomogenes B-Feld existiert. Eine numerische Berechnung des WLEW für das konstante B-Feld führt jedoch auf dieselbe Problematik, wodurch die Verwendung von Analogien motiviert wird.

Beiträge außerhalb des Schwerpunktes x_{CM} erhält. Die Verwendung einer modifizierten bzw. anderen Renormierungsprozedur könnte daher sinnvoll sein. In der Masterarbeit wurden allerdings keine Untersuchungen in dieser Richtung vorgenommen.

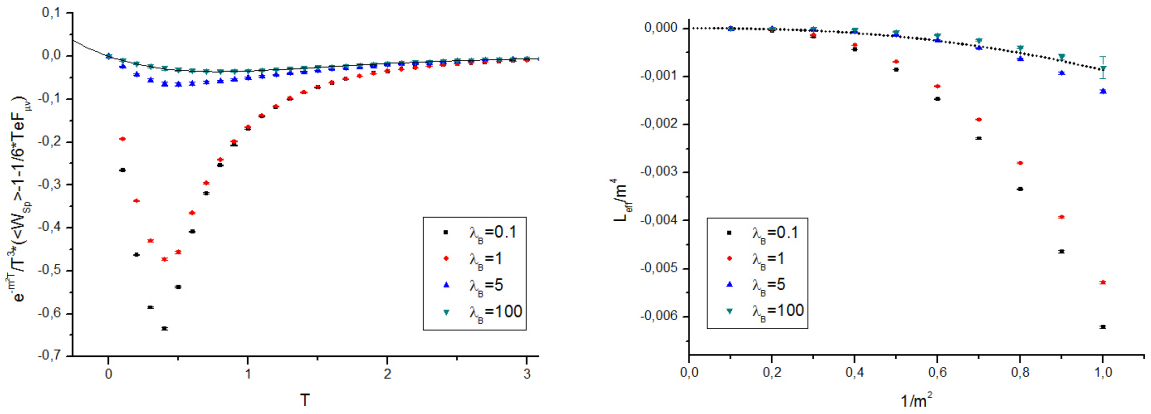

Abbildung 2: Integrand der Effektiven Lagrangedichte aufgetragen über dem Eigenzeitparameter (links) und spinorielle effektive Lagrangedichte(rechts) in $d = 3+1$ bei $x_{\mathrm{CM}} = 0$. Das B-Feld wird durch $\overline{B} = 1$ und $B_1 = 0.5 \cdot \overline{B}$ charakterisiert. Die durchgezogene schwarze Linie im linken Bild kennzeichnet den analytischen Integranden des lokal konstanten B-Feldes. Rechts wird die analytische Lösung durch eine gepunktete schwarze Linie dargestellt.

Wir wollen an dieser Stelle noch Anmerkungen zur Ableitungsentwicklung machen. Diese dient als Korrektur der effektiven Wirkung für Feldkonfigurationen, welche nur gering vom konstanten Feld abweichen. Die Korrekturterme werden dabei durch Entwicklung der effektiven Wirkung nach Ordnungen der Ableitung der Wirkung nach der Feldstärke erzeugt. Z.B. in [40] wurde der Korrekturterm 1.Ordnung für die spinorielle QED analytisch explizit berechnet, welcher proportional zum Quadrat der Ableitung des Magnetfeldes ist: $\mathcal{L}_{der}^{spin}(B) \sim (\partial_i B)^2$. Da Abb. 2 die effektive Lagrangedichte im Maximum des Magnetfeldes (43) darstellt, verschwindet somit dieser erste Korrekturterm und die Ableitungsentwicklung zur entsprechenden Ordnung liefert an dieser Stelle keine Korrektur.

2.6 Beispiel 2: Effektive Lagrangedichte für lokalisiertes, linear anwachsendes B-Feld

Die Untersuchung des Graphens brachte zahlreiche interessante elektronische Eigenschaften mit sich, welche zuvor nicht in gewöhnlichen Materialien beobachtet werden konnten [6]. Eine Möglichkeit der Manipulation der elektronischen Eigenschaften zeigt sich in der kontrollierten Anwendung mechanischer Spannung auf das Graphen. Diese hat zur Folge, dass bei geeigneter elastischer Dehnung uniforme Pseudomagnetfelder erzeugt werden können, welche leicht Feldstärken von $10T$ übersteigen können ohne die Bandstruktur des Graphens signifikant zu ändern [33, 32, 6].
Wir wollen an dieser Stelle ein Eichpotential diskutieren, welches das (Pseudo-)Magnetfeld in einer

mechanisch leicht gebogenen Graphenschicht der Länge L gut approximiert [32, 7]:

$$A_{x_1}(x_2) = \underbrace{\frac{t_0}{v_F|e|}H}_{=:B_{max}/L}\left(\frac{x_2^2}{2} - x_2 L\right). \tag{51}$$

Hierbei stellt $t_0 \approx 3eV$ die nächste-Nachbar-Hopping-Energie im Tight-Binding Model dar und $v_F = t_0 a_0/\hbar$ ist die Fermigeschwindigkeit, welche in Graphen 1/300 der Lichtgeschwindigkeit beträgt und $a_0 = 1.4 \cdot 10^{-10} m$ der Abstand der Kohlenstoffatome [6]. Außerdem haben wir die maximale Magnetfeldstärke B_{max} eingeführt. Es stellt sich folglich ein von $B(x_2 = 0) = B_{max}$ auf $B(x_2 = L) =: B_{min}$ linear abfallendes B-Feld ein.

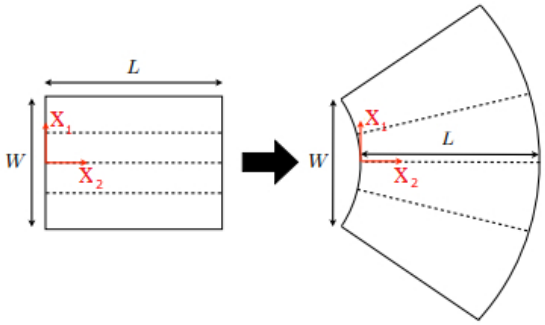

Abbildung 3: Entnommen aus Ref. [7]. Es ist eine Graphenkonfiguration dargestellt, die für $\frac{W}{R} \to 0$ näherungsweise zu einem linear ansteigenden B-Feld führt.

Wir wollen an dieser Stelle von einem linear *ansteigenden* Magnetfeld der Form

$$\begin{aligned} B &= \frac{B_{max}}{L} x_2 \left(\Theta(x_2) - \Theta(x_2 - L)\right) \\ &= \frac{B_{max}}{L}\left(\sqrt{T}y_2(t) + x_{\mathrm{CM}}\right)\Big(\underbrace{\Theta\left(\sqrt{T}y_2(t) + x_{\mathrm{CM}}\right)}_{=:\Theta_0} - \underbrace{\Theta\left(\sqrt{T}y_2(t) + x_{\mathrm{CM}} - L\right)}_{=:\Theta_L}\Big) \end{aligned} \tag{52}$$

mit $B_{min} = 0$ ausgehen. Für $x_2 < 0$ und $x_2 > L$, also außerhalb des Graphens wird folglich angenommen, dass das B-Feld verschwindet. Durch die Definition der maximalen B-Feldstärke B_{max} können wir wieder wie beim vorherigen Beispieleichpotential den lokal konstanten B-Feld-Fall diskutieren. Führen wir die dimensionslose Schwerpunktskoordinate k durch $x_{\mathrm{CM}} = k \cdot L$ ein und betrachten den Grenzfall $L \to \infty$, so ergibt sich für $k \neq 0$ das lokale B-Feld

$$B(k) = B_{max} k(\Theta(k) - \Theta(k-1)). \tag{53}$$

Zur Berechnung des gesuchten WLEW brauchen wir ein für (52) adäquates Eichpotential, welches wir uns durch Integration beschaffen:

$$A_1(x_2) = \int dx_2\ B(x_2) = \frac{B_{max}}{L}\frac{x_2^2}{2}(\Theta_0 - \Theta_L) + \frac{B_{max}}{L}\frac{L^2}{2}\Theta_L. \tag{54}$$

Damit erhalten gemäß (45) den entsprechenden WLEW für das gegeben Potential:

$$\langle W_{Sp}\rangle = \left\langle \cos\left(e\sqrt{T}\int_0^1 dt\ \dot{y}_\mu A^\mu\left(\sqrt{T}y(t)+x_{\mathrm{CM}}\right)\right) tr_\gamma \mathcal{P} e^{\frac{ie}{2}\int_0^1 dt\ \sigma^{\mu\nu}F_{\mu\nu}(\sqrt{T}y(t)+x_{\mathrm{CM}})}\right\rangle$$

$$\begin{aligned}\int_0^1 dt\ \dot{y}_\mu A^\mu = \frac{B_{max}}{2}\frac{T}{L}\int_0^1 dt\ \dot{y}_1 y_2^2(\Theta_0-\Theta_L) + B_{max}\sqrt{T}k\int_0^1 dt\ \dot{y}_1 y_2(\Theta_0-\Theta_L)\\ + \frac{B_{max}}{2}Lk^2\int_0^1 dt\ \dot{y}_1(\Theta_0-\Theta_L) + \frac{B_{max}}{2}L\int_0^1 dt\ \dot{y}_1\Theta_L\end{aligned} \tag{55}$$

$$tr_\gamma \mathcal{P} e^{\frac{ie}{2}\int_0^1 dt\ \sigma^{\mu\nu}F_{\mu\nu}} \overset{(C.37)}{=} 4\cdot\cosh\left(eTB_{max}\int_0^1\left(\frac{\sqrt{T}}{L}y_2(t)+k\right)(\Theta_0-\Theta_L)dt\right)$$

Hierbei ist zu beachten, dass wegen der Stufenfunktionen die Integration über $\dot{y}_1$ nicht verschwindet. Die Stufenfunktionen werden dadurch implementiert, dass nur Looppunkte $y_{2,k}$ in die Berechnung des Erwartungswertes mit einfließen, für welche die Bedingungen

$$0 < \sqrt{T}y_{2,k} + x_{\mathrm{CM}} < L \tag{56}$$

erfüllt sind.
In Abb. 4 ist die effektive Lagrangedichte ohne (endlichen)1 Feldstärkerenormierungsterm für verschiedene Längen L und $m = 1$ in $d = 2{+}1$ dargestellt. Dabei wurden Loopensembles mit $n_L = 5000$ Loops mit jeweils $N = 1000$ Stützstellen zur Erzeugung der Daten verwendet. Als maximale Feldstärke wurde $B_{max} = 1$ benutzt.

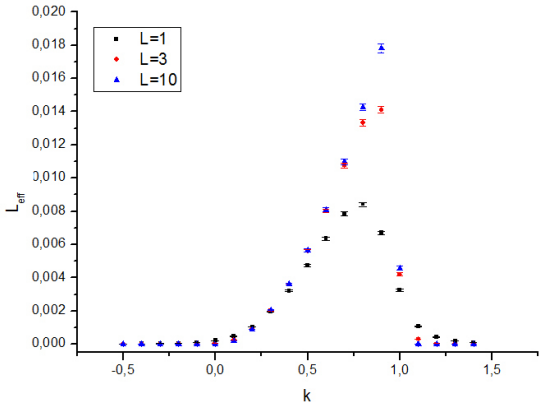

Abbildung 4: Es sind die effektiven Lagrangedichten für verschiedenen Längen L aufgetragen über der dimensionslosen Schwerpunktskoordinate k für $m = 1$.

Auch hier zeigt sich der in [22] bei einer magnetischen Stufe beobachtete Quantendiffusioneffekt: aufgrund der Skalierung der Loopensembles mit T am jeweiligen Schwerpunkt k durch den Eigenzeitparameter T „spüren" auch Punkte $k > 1$ oder $k < 0$ das Magnetfeld. Die Loops, welche die Umgebung des Ensembleschwerpunktes abtasten, liefern somit in jedem Fall Beiträge zum WLEW, resultierend in einer nichtverschwindenden effektiven Lagrangedichte an Orten an denen kein Magnetfeld vorhanden ist. Wir werden das Abfallverhalten für $k \to \pm\infty$ in Kapitel 3.2 für das chirale

Kondensat analytisch untersuchen.
In der Möglichkeit der Untersuchung lokalisierter Potentiale zeigt sich, neben der Betrachtbarkeit stark inhomogener Felder ein weiterer Vorteil der Weltliniennumerik gegenüber der Ableitungsentwicklung. Für den numerischen Formalismus stellen Stufenfunktionen wie in (52) kein Problem dar. Die Anzahl der die Stufe überschreitenden Looppunkte wird durch die Skalierung des Loopensembles mit T sanft reguliert, weshalb solche Diskontinuitäten für die Numerik keine harten Übergänge sind.
Es zeigt sich allerdings auch eine weitere Problematik, die sich aus der Diskretisierung der Loops ergibt. Für große T-Werte werden irgendwann sämtliche Looppunkte außerhalb des B-Feldes liegen und der WLEW zwangsläufig verschwinden. Damit wird die Untersuchung kleiner Fermionenmassen stark erschwert. Der WLEW für asymptotisch große T muss demzufolge extrapoliert oder die Loops, falls möglich, durch geeignete Methoden so erzeugt werden, dass sie bereits Informationen über das B-Feld tragen.

2.7 Fermionischer Wilson-Loop-Erwartungswert

In diesem Kapitel wollen wir einen Ansatz untersuchen, der die bereits erwähnte numerische Problematik des fermionischen WLEW im Bereich großer T für Eichpotentiale der Form

$$A_1\left(\sqrt{T}y_2(t)+x_{\mathrm{CM}}\right)=A_{const,1}+A_{var,1}=B\cdot\left(\sqrt{T}y_2(t)+x_{\mathrm{CM}}\right)+A_{var,1}, \tag{57}$$

wie es im Beispiel (42) diskutiert wurde, mindern soll. Dabei stellt $A_{var,1}$ eine Variation gegenüber einem rein konstanten B-Feld dar (vgl. (42)). In unserem Ansatz zerlegen wir den WLEW (31) in das Produkt aus dem WLEW des konstanten Feldes und dem WLEW des variierenden Eichpotentials:

$$\begin{aligned}\langle W_{Sp}\rangle &= \frac{\int_{\substack{y(0)=y(1)\\ x_{\mathrm{CM}}}}\mathcal{D}y(t)e^{-ie\int_0^1 dt\sqrt{T}\dot{y}A_{const}}e^{-\int_0^1 dt\frac{\dot{y}^2}{4}}}{\int_{\substack{y(0)=y(1)\\ x_{\mathrm{CM}}}}\mathcal{D}y(t)e^{-\int_0^1 dt\frac{\dot{y}^2}{4}}}\\ &\quad\cdot\frac{\int_{\substack{y(0)=y(1)\\ x_{\mathrm{CM}}}}\mathcal{D}y(t)e^{-ie\int_0^1 dt\sqrt{T}\dot{y}A_{var}}tr_\gamma\mathcal{P}e^{\frac{ie}{2}\int_0^1 dt\sigma^{\mu\nu}F_{\mu\nu}}e^{-\int_0^1 dt(\frac{\dot{y}^2}{4}+ie\sqrt{T}\dot{y}A_{const})}}{\int_{\substack{y(0)=y(1)\\ x_{\mathrm{CM}}}}\mathcal{D}y(t)e^{-\int_0^1 dt(\frac{\dot{y}^2}{4}+ie\sqrt{T}\dot{y}A_{const})}}\\ &= \langle W_{const}\rangle\langle W_{var}\rangle_A.\end{aligned} \tag{58}$$

Unser Problem wurde folglich auf die Berechnung von $\langle W_{var}\rangle_A$ zurückgeführt. Für $\langle W_{const}\rangle$ verwenden wir die bekannte analytische Lösung des konstanten B-Feldes. Im Vergleich zu den bisher zu berechnenden Erwartungswerten müssen nun die Loops gemäß des neuen Gewichtungsfaktors

$$e^{-\int_0^1 dt(\frac{\dot{y}^2}{4}+ie\sqrt{T}\dot{y}A_{const})} \tag{59}$$

bzw. in diskretisierter Form

$$\begin{aligned}&P[\{y_k\}]=\delta(y_{2,1}+...+y_{2,N})\cdot\delta(y_{1,1}+...+y_{1,N})\\ &\cdot\exp\left[-\frac{N}{4}\left\{\sum_{k=1}^{N}\left((y_{2,k}-y_{2,k-1})^2+(y_{1,k}-y_{1,k-1})^2-\frac{4ieTB}{N}\frac{(y_{1,k}+y_{1,k-1})}{2}(y_{2,k}-y_{2,k-1})\right)\right\}\right]\end{aligned} \tag{60}$$

erzeugt werden, was durch $\langle\rangle_A$ gekennzeichnet wird. Hierbei wurde das Eichpotential bereits eingesetzt und die Integration des x_{CM}-abhängigen Terms, der wegen $y(0) = y(1)$ wegfällt, vorgenommen. Die Indizierung der Looppunkte kennzeichnet zum einen die Diskretisierung der Loops und zum anderen die Dimension. Die notwendigen Dimensionen „1" und „2" ergeben sich hierbei gemäß (57) und (59) aus dem Term $ie\sqrt{T}\dot{y}A_{const} = ieB\sqrt{T}\dot{y}_1 y_2$, welcher beide Dimensionen koppelt. Man beachte dabei, dass A_{const} in euklidischer Formulierung vorliegt. Beide Dimensionen müssen folglich simultan erzeugt werden. Der bisher verwendete vloop-Algorithmus eignet sich hierzu nicht mehr. Um Loops gemäß (59) zu erzeugen, bringen wir die quadratische Form im Exponenten von (60) zunächst auf Diagonalform mit dem Ziel das Box-Muller-Verfahren zur Erzeugung normalverteilter Zufallszahlen anwenden zu können. Dazu fassen wir die beiden Indizes der Looppunkte $y_{\mu,i}$ zu einem Index zusammen

$$J = 2i + \mu - 1; \quad i = 0,\ ..., N; \quad \mu = 1;\ 2 \tag{61}$$

und erhalten somit

$$\begin{aligned} P[\{y_k\}] &= \delta(y_3 + y_5 ... + y_{2N+1}) \cdot \delta(y_2 + y_4 ... + y_{2N}) \\ &\cdot \exp\left[-\frac{N}{4}\left\{\sum_{k=1}^{N}(y_{2k+1} - y_{2k-1})^2 + (y_{2k} - y_{2k-2})^2 - \frac{2ieTB}{N}(y_{2k} + y_{2k-2})(y_{2k+1} - y_{2k-1})\right\}\right]. \end{aligned} \tag{62}$$

Abspaltung des ersten und letzten Terms der Summe und anschließende Integration über $y_{\mu,0} = y_{\mu,N}$ mit Hilfe der Deltadistribution in Analogie zum vloop-Algorithmus [24] führt dann auf:

$$\exp\left[-\frac{N}{4}Q\right] \tag{63}$$

mit der quadratischen Form

$$\begin{aligned} Q = \sum_{k=2}^{N-1}&\left\{(y_{2k+1} - y_{2k-1})^2 + (y_{2k} - y_{2k-2})^2 - \frac{2ieTB}{N}(y_{2k} + y_{2k-2})(y_{2k+1} - y_{2k-1})\right\} \\ &+ (2y_3 + y_5 + ... + y_{2N-1})^2 + (y_3 + y_5 + ... + 2y_{2N-1})^2 \\ &+ (2y_2 + y_4 + ... + y_{2N-2})^2 + (y_2 + y_4 + ... + 2y_{2N-2})^2 \\ &+ \frac{2ieTB}{N}[(y_4 + y_6 + ... + y_{2N-2})(2y_3 + y_5 + ... + y_{2N-1}) \\ &\qquad - (y_2 + y_4 + ... + y_{2N-4})(y_3 + y_5 + ... + 2y_{2N-1})] \end{aligned} \tag{64}$$

Es gibt zwei Möglichkeiten die entsprechende quadratische Form auf Diagonalform zu bringen. Zum Beispiel kann man die Matrix einfach durch Berechnung der Eigenwerte diagonalisieren, was allerdings auf komplexe Eigenwerte bzw. Eigenvektoren führt. Dadurch allerdings werden die neuen Looppunkte v_i zum einen komplex:

$$Q = y^T M y = y^T S \underbrace{S^{-1} M S}_{=D} S^{-1} y = y^T S D S^{-1} y = v^T D v = \sum_{i=1}^{N} \lambda_i v_i^2. \tag{65}$$

mit $v_i \in \mathbb{C}$. Zum anderen kann man durch konkrete Berechnungen überprüfen, dass sich sowohl negative als auch positive Eigenwerte ergeben können. Somit kann das Box-Muller-Verfahren nicht mehr angewendet werden.
Eine andere Möglichkeit ist es, M durch quadratische Ergänzung auf Diagonalform zu bringen. Wählen wir nun sowohl die Koeffizienten λ_i als auch die v_i reell, so können wir diese mit dem

Box-Muller-Verfahren erzeugen. Allerdings werden bei der Rücktransformation die ursprünglichen Looppunkte $y_{\mu,i}$ komplex, was dazu führt, dass man im Pfadintegral nicht mehr über die reelle Achse integriert sondern über eine komplexe Kontur. Das ist nur dann problemlos möglich, falls bei der Transformation der Integrationskontur keine Pole überschritten werden. Darüber können wir a priori allerdings keine Aussage treffen. Wir werden im Folgenden die quadratische Ergänzung anwenden und mit den daraus gewonnenen Loops, die Gültigkeit des Ansatzes (58) anhand der Berechnung des WLEW für das Eichpotential (42) testen. Gegeben sei also die quadratische Form in ihrem Ausgangszustand (64):

$$Q = \sum_{i,j=2}^{2N-1} a_{i,j} y_i^{(0)} y_j^{(0)}. \tag{66}$$

Hierbei kennzeichnet der Index (0) die noch nicht transformierten Looppunkte. Nach jeder Substitution wird er um Eins erhöht. Q können wir auf Diagonalform bringen, indem wir sukzessiv die Mischterme durch geeignete Substitutionen wegtransformieren. Und zwar machen wir zunächst den Ansatz

$$\left(y_2^{(0)}\right)^2 = \left(y_2^{(1)} - c_{2,2} y_3^{(0)}\right)^2 \tag{67}$$

und bestimmen den Koeffizienten $c_{2,2}$ so, dass sich der Term $-2c_{2,2}y_2^{(1)}y_3^{(0)}$ mit dem bereits vorhandenen Mischterm $a_{2,3}y_2^{(1)}y_3^{(0)}$ in (66) wegkürzt. Der Ansatz (67) muss entsprechend in jeden $y_2^{(0)}$ enthaltenden Term eingesetzt werden, sodass die Koeffizienten $a_{i,j}$ in (66) anschließend neu berechnet werden müssen. Das selbe Verfahren wenden wir nun an um sämtliche y_2 enthaltenden Mischterme zu entfernen:

$$\begin{aligned} &\left(y_2^{(1)}\right)^2 = \left(y_2^{(2)} - c_{3,2} y_4^{(0)}\right)^2 \\ &... \\ &\left(y_2^{(2N-4)}\right)^2 = \left(y_2^{(2N-3)} - c_{2N-2,2} y_{2N-1}^{(0)}\right)^2. \end{aligned} \tag{68}$$

Analog können wir die y_3 - Mischterme entfernen,

$$\begin{aligned} &\left(y_3^{(0)}\right)^2 = \left(y_3^{(1)} - c_{3,3} y_4^{(0)}\right)^2 \\ &... \\ &\left(y_3^{(2N-5)}\right)^2 = \left(y_3^{(2N-4)} - c_{2N-2,3} y_{2N-1}^{(0)}\right)^2, \end{aligned} \tag{69}$$

wodurch wir den neuen Koeffizienten $a_{3,3}$ erhalten. Entsprechende Transformationen führen wir ebenfalls für die $y_4, y_5, ..., y_{2N-2}$ - Mischterme durch. Dadurch gewinnen wir letztendlich die reellen Koeffizienten $a_{i,i} =: \lambda_i$, welche von B, T und N abhängen. Es ergibt sich somit:

$$\exp\left[-\frac{N}{4}Q\right] = \exp\left[-\frac{N}{4}\sum_{i=2}^{2N-1} \lambda_i \left(y_i^{(2N-1-i)}\right)^2\right] \tag{70}$$

Die $y_i^{(2N-1-i)}$ können nun mittels Box-Muller-Methode berechnet werden durch Erzeugung von Standardnormalverteilten w_i und anschließender Normierung:

$$y_i^{(2N-1-i)} = \frac{2}{\sqrt{N\lambda_i}} w_i, \qquad i = 2, ..., 2N-1. \tag{71}$$

Danach führen wir die Schritte (67) bis (71) rückwärts aus und erhalten somit $y_{2N-1}^{(0)},\ ..., y_2^{(0)}$. Die so erzeugten Looppunkte müssen wir nun noch auf die beiden ursprünglichen Dimensionen aus Gleichung (60) aufteilen. Gemäß (61) gehören die Punkte $y_2^{(0)} = y_{1,1},\ ..., y_{2N-2}^{(0)} = y_{1,N-1}$ zur Richtung des konstanten B-Feldes und die Punkte $y_3^{(0)} = y_{2,1}, ..., y_{2N-1}^{(0)} = y_{2,N-1}$ zur verbleibenden Dimension. Die beiden Punkte $y_{2,N}$ und $y_{1,N}$ ergeben sich bedingt durch die Deltadistribution in (62) zu:

$$y_{2,N} = -\sum_{i=1}^{N-1} y_{2,i}, \qquad y_{1,N} = -\sum_{i=1}^{N-1} y_{1,i}. \tag{72}$$

Somit wurde ein Loop generiert. Zur Erzeugung weiterer Loops muss der Vorgang ab dem Box-Muller-Verfahren mit neuen Zufallszahlen wiederholt sowie der komplette Prozess für jedes T nochmals durchgeführt werden. Der Zeitaufwand zur Erzeugung der Loops steigt somit im Vergleich zum vloop-Algorithmus deutlich, weshalb zur Untersuchung der Tauglichkeit des in diesem Kapitel gewählten Ansatzes Plots mit $n_L = 1000$ und $N = 1000$ im Vergleich zu $n_L = 1000$ und $N = 40000$, die wir in Kap. 2.5 verwendet haben, erzeugt werden. Eine Zusammenfassung des Algorithmus findet sich in Appendix D.
Wir wenden den Ansatz (58) zur Demonstration auf das Eichpotential (42) an. Schon bei der Berechnung des skalaren WLEW stellt sich die Problematik des hier angewendeten Verfahrens heraus. Die Observable des Erwartungswertes $\langle W_{Var}\rangle_A$ zeigt für einzelne Loops des jeweils erzeugten Ensembles ein mit T exponentiell ansteigendes Verhalten, was den mit dem obigen Algorithmus erzeugten komplexen Loops $y(t) = \Re(y(t)) + i \cdot \Im(y(t))$ geschuldet ist. Die Exponentialfunktion

$$\exp\left(-ie\sqrt{T}\int_0^1 dt\ \dot{y}A_{var}\right) = \exp\left(-ieTB_1\int_0^1 dt\ y_1 y_2 \cos\left(\frac{2\pi}{\lambda_B}\left(\sqrt{T}y_1(t) + x_{\mathrm{CM}}\right)\right)\right) \tag{73}$$

bzw. ihr Argument steigt aufgrund der exponentiellen Anteile des komplexen *Cosinus* für diese kritischen Loops bereits stark an, wodurch der WLEW durch diese dominiert wird. Kleinere Wellenlängen λ_B führen dabei zu einem zunehmend schneller variierenden *Cosinus*, was zu einem eher einsetzenden exponentiellen Anstieg führt. Somit zeigt sich schon bei der numerischen Berechnung des skalaren WLEW, dass der von uns untersuchte Ansatz (58) untauglich zu sein scheint. Das Verfahren sollte jedoch an weiteren Eichpotentialen getestet werden.

Wir wollen an dieser Stelle noch Bemerkungen zu einem weiteren möglichen Ansatz für uniaxiale Magnetfelder machen. Dieser kombiniert Ideen des Ansatzes (58) und [13]. Dazu schreiben wir wiederum den spinorielle WLEW als Produkt von zwei Erwartungswerten. Dabei soll einer der Erwartungswerte mit den herkömmlichen vloops berechnet werden und der andere mit Hilfe der Hybrid-Monte-Carlo-Methode über modifizierte Loops die an ein entsprechend neues Gewicht angepasst werden [13].
Um den WLEW (31) wie angedacht zu splitten, ohne auf komplexe Loops zurückgreifen zu müssen, schreiben wir den *Cosinushyberbolicus* des Spinfaktors (siehe Gleichung (C.37)) als Summe aus Exponentialfunktionen und erhalten damit:

$$\begin{aligned}\langle W_{Sp}\rangle = 2\sum_{\lambda=\pm} &\frac{\int_{x(0)=x(T)}\mathcal{D}x(\tau)e^{\lambda e\int_0^T d\tau B(x(\tau))}e^{-\int_0^T d\tau\frac{\dot{x}^2}{4}}}{\int_{x(0)=x(T)}\mathcal{D}x(\tau)e^{-\int_0^T d\tau\frac{\dot{x}^2}{4}}} \\ &\cdot\frac{\int_{x(0)=x(T)}\mathcal{D}x(\tau)e^{-ie\int_0^T d\tau\dot{x}A(x(\tau))}e^{-\int_0^T d\tau\frac{\dot{x}^2}{4}+\lambda e\int_0^T d\tau B(x(\tau))}}{\int_{x(0)=x(T)}\mathcal{D}x(\tau)e^{-\int_0^T d\tau\frac{\dot{x}^2}{4}+\lambda e\int_0^T d\tau B(x(\tau))}}.\end{aligned} \tag{74}$$

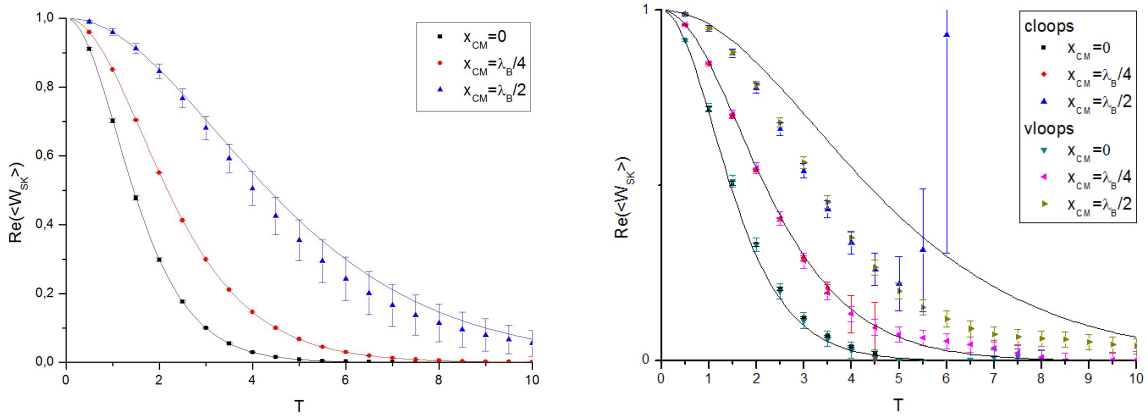

Abbildung 5: Der skalare WLEW des Eichpotentials (42) wurde mit Hilfe komplexer Loops(*cloops*) für $\lambda_B = 100$(links) und $\lambda_B = 5$(rechts) berechnet und über dem Eigenzeitparameter T dargestellt. Für $\lambda_B = 5$ wurden des Weiteren zum Vergleich der mit *vloops*($N = 1000$, $n_L = 1000$) berechnete WLEW eingezeichnet. Des Weiteren kennzeichnen im linken Bild durchgezogene Linien den analytischen WLEW bei $x_{\mathrm{CM}} = 0$(schwarz), $x_{\mathrm{CM}} = \lambda_B/4$(rot) und $x_{\mathrm{CM}} = \lambda_B/2$(blau). Rechts sind diese als schwarze Linien zu sehen. Bis $T = 4 - 5$ stimmen diese noch mit den cloop Werten noch überein, dann jedoch divergieren die mit den cloops berechneten WLEW.

Hierbei haben wir auf die Darstellung der Pfadintegrale ohne Einheitsloops zurückgegriffen. Für B-Felder der Form $B(x(\tau)) = B + B_{var}(x(\tau))$ können wir (74) noch weiter vereinfachen, indem wir den konstanten loopunabhängigen Teil aus dem Erwartungswert ziehen. Des Weiteren lässt sich der ungerade Anteil der Exponentialfunktion im ersten Erwartungswert wieder abspalten. Das Gewicht des zweiten Erwartungswertes muss hingegen nicht invariant unter der Loopumkehr sein. Damit schreiben wir (74) als

$$\langle W_{Sp}\rangle = 2\sum_{\lambda=\pm} e^{\lambda eTB}\Big\langle \cosh\left(\lambda e\int_0^T d\tau B(x(\tau))\right)\Big\rangle \cdot \langle W_{Sk}\rangle_{var,\lambda}, \tag{75}$$

wobei $\langle\rangle_{var,\lambda}$ die Berechnung des Erwartungswertes bzgl. des Gewichts

$$e^{-\int_0^T d\tau \frac{\dot{x}^2}{4} + \lambda e\int_0^T d\tau B_{var}(x(\tau))} \tag{76}$$

kennzeichnet. Die Loops gemäß (76) sollen dabei durch die Hybrid-Monte-Carlo-Methode erzeugt werden. Der Ansatz konnte im Rahmen der Masterarbeit nicht mehr ausreichend getestet werden.

3 Chirales Kondensat

Es wird zunächst eine Formulierung der $(2+1)$-dimensionalen QED vorgestellt und kurz das Verhalten des Lagrangians unter diskreten Symmetrien diskutiert. Ziel wird eine paritätsinvariante Formulierung der QED_{2+1} sein, welche z.B. zur Beschreibung von niederenergetischen Anregungen in Graphen dient. Danach wird das chirale Kondensat im Grenzfall $m \to 0$ für das sinusförmige B-Feld aus Kap. 2.5 analytisch bestimmt und mit weltliniennumerisch extrapolierten Ergebnissen verglichen. Die analytischen Ergebnisse werden außerdem hinsichtlich verschiedener Grenzfälle diskutiert. Selbiges wird für das linear ansteigende, lokalisierte Magnetfeld aus Kap. 2.6 getan. Für dieses bestimmen darüberhinaus das Abfallverhalten des chiralen Kondensats außerhalb des B-Feldes. Des Weiteren wird als Anwendung der numerischen Ergebnisse die magnetische Katalyse in inhomogenen Magnetfeldern vorgestellt und anschließend die Beobachtbarkeit unserer Ergebnisse zum chiralen Kondensat aus diesem Kapitel in Graphen diskutiert.

3.1 2+1 dimensionale Formulierung der QED

Bei der Einführung der QED_{2+1} werden wir im Allgemeinen den Betrachtungen in [19] folgen. Gegeben sei also zunächst die Lagrangedichte einer irreduziblen abelschen U(1)-Eichtheorie:

$$\mathcal{L} = \overline{\psi}(i\not{D} - m)\psi - \frac{1}{4}F_{\mu\nu}F^{\mu\nu} + \frac{\mu}{4}\epsilon^{\mu\nu\sigma}F_{\mu\nu}A_\sigma \tag{77}$$

mit $\not{D} = \gamma^\mu(\partial_\mu - ieA_\mu)$. Signifkikanter Unterschied zur QED_{3+1} stellt hierbei der topologische Massenterm für das Eichfeld dar. Die dazugehörigen Bewegungsgleichungen für das Spinor- bzw. Eichfeld ergeben sich durch Variation der Wirkung S zu

$$\begin{aligned} \frac{\delta S}{\delta\overline{\psi}} &= (i\not{D} - m)\psi = 0 \\ \frac{\delta S}{\delta A_\rho} &= e\overline{\psi}\gamma^\rho\psi - \partial_\mu F^{\mu\rho} + \frac{\mu}{2}\epsilon^{\mu\nu\rho}F_{\mu\nu} = 0. \end{aligned} \tag{78}$$

Definiert man in die γ-Matrizen gemäß[2]

$$\gamma^0 = \sigma^3 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}, \quad \gamma^1 = i\sigma^1 = \begin{pmatrix} 0 & i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \gamma^2 = i\sigma^2 = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ -1 & 0 \end{pmatrix}, \tag{79}$$

so lässt sich die Dirac-Algebra in $(2+1)$-Dimensionen durch[19]

$$\gamma^\mu\gamma^\nu = -g^{\mu\nu} + i\epsilon^{\mu\nu\sigma}\gamma_\sigma, \quad g^{\mu\nu} = diag(-1,1,1) \tag{80}$$

realisieren.
Wir wollen im Folgenden die QED_{2+1} kurz bzgl. diskreter Symmetrietransformationen, insbesondere der Paritätstransformation P, diskutieren. Diese lässt sich in drei Dimensionen realisieren durch eine Spiegelung an *einer* Achse. Die zugehörige Transformationen der Felder, wobei $x_0 = t$ ist, lauten dann bei Spiegelung an der x_1-Achse [2]:

$$\begin{aligned} &PA^0(t,x_1,x_2)P^{-1} = A^0(t,-x_1,x_2), \quad PA^1(t,x_1,x_2)P^{-1} = -A^1(t,-x_1,x_2), \\ &PA^2(t,x_1,x_2)P^{-1} = A^2(t,-x_1,x_2), \quad P\psi(t,x_1,x_2)P^{-1} = \sigma_1\psi(t,-x_1,x_2) = \sigma_1\psi_P. \end{aligned} \tag{81}$$

Aus der Anwendung auf die Bewegungsgleichungen (78) folgt unter der Beachtung der Antikommutationseigenschaft der Pauli-Matrizen die Vorzeichenumkehr der Masse des Diracfelds

$$\begin{aligned} &P(i\not{D} - m)\psi P^{-1} = \left(-i\gamma^0(\partial_0 - eA_0) - i\gamma^1(\partial_1 - eA_1) + i\gamma^2(\partial_2 - eA_2) - m\right)\sigma_1\psi_P = 0 \\ &\Rightarrow (i\not{D} + m)\psi_P = 0. \end{aligned} \tag{82}$$

und auf analoge Weise die der Masse μ des Eichfeldes. Selbiges ergibt sich für die Zeitumkehrtransformation, Ladungskonjugation hingegen lässt die Gleichungen invariant [19]. Somit ist die irreduzible Formulierung der QED_{2+1} (77) nicht paritätsinvariant. Eine paritätsinvariante Formulierung kann jedoch durch die Einführung einer geraden Anzahl von Fermionflavour erreicht werden [50]. Dafür erweitert man den Hilbertraum z.B. um ein Flavour, indem man die Gammamatrix

$$\Gamma^\mu = \begin{pmatrix} \gamma^\mu & 0 \\ 0 & -\gamma^\mu \end{pmatrix}, \quad \mu = 0, 1, 2, \tag{83}$$

einführt, und ersetzt entsprechend die bisherigen zweikomponentigen Spinoren durch vierkomponentige

$$\psi = \begin{pmatrix} \psi_+ \\ \psi_- \end{pmatrix}. \tag{84}$$

Das negative Vorzeichen in den unteren Blöcken der Gammamatrizen (83) hat hierbei zum einen zur Folge, dass sich eine verallgemeinerte Paritätstransformation[2]

$$P\psi_+P^{-1} = \sigma_1\psi_-, \quad P\psi_-P^{-1} = \sigma_1\psi_+, \tag{85}$$

definieren lässt, unter der die Bewegungsgleichungen

$$(i\Gamma^\mu D_\mu - m)\psi = 0 \tag{86}$$

invariant sind. Zum anderen lässt sich eine weitere mit den Gammamatrizen (83) antikommutierende Matrix $\Gamma_3 = \begin{pmatrix} 0 & i \\ i & 0 \end{pmatrix}$ einführen, die die Definition der chiralen Matrix $\Gamma_5 = i\Gamma^0\Gamma^1\Gamma^2\Gamma^3$ erlaubt [48][4]. Mit Hilfe der paritätsinvarianten Formulierung lässt sich der fermionische Anteil der Lagrangedichte schreiben als Summe über die Lagrangedichten der beiden Flavours. Um das zu sehen, betrachten wir zum einen den Massenterm

$$m\overline{\psi}\psi = m\psi^\dagger\Gamma^0\psi = m(\overline{\psi}_+\psi_+ - \overline{\psi}_-\psi_-) = m\sum_{\lambda=\pm}\lambda\overline{\psi}_\lambda\psi_\lambda \tag{87}$$

und zum anderen den kinetischen Term:

$$\overline{\psi}\Gamma^\mu D_\mu\psi = \psi^\dagger\Gamma^0\Gamma^\mu D_\mu\psi = \psi_+^\dagger\gamma^0\gamma^\mu D_\mu\psi_+ + \psi_-^\dagger\gamma^0\gamma^\mu D_\mu\psi_- = \sum_{\lambda=\pm}\overline{\psi}_\lambda\not{D}\psi_\lambda. \tag{88}$$

Somit ergibt sich als fermionischer Anteil der Lagrangedichte[48]:

$$\mathcal{L} = \sum_{\lambda=\pm}\overline{\psi}_\lambda\left[i\not{D} - \lambda m\right]\psi_\lambda. \tag{89}$$

[4]Diese chirale Matrix erlaubt in $d = 2 + 1$ die Durchführung der Umformungen in Gleichung (21) und somit die Einführung des Weltlinien-Hamiltonoperator (22), welcher als Ausgangspunkt des Weltlinienformalismus bzw. der Weltliniennumerik dient. Dieser ist mit der irreduziblen Formulierung nicht möglich.

Diese ist offensichtlich zum einen invariant unter der verallgemeinerten Paritätstransformation (85), welche nun sowohl eine Spiegelung an der x-Achse vollzieht, als auch die beiden Fermionflavours vertauscht. Und zum anderen ist sie invariant unter der chiralen Transformation $\psi \to e^{-i\Gamma^5}\psi$ im chiralen Limes $m \to 0$. Somit ist diese reduzible Formulierung der QED_{2+1} auf klassischer Ebene sowohl paritätsinvariant als auch chiral symmetrisch im besagten Limes. Die Transformation (85) und die Lagrangedichte (89) lassen sich wie bereits erwähnt auf eine beliebige geradzahlige Anzahl von Fermionflavours verallgemeinern, so dass für eine entsprechende Theorie auf klassischer Ebene sowohl Paritätsinvarianz als auch die chirale Symmetrie erreicht werden kann [50]. Auf quantenmechanischer Ebene muss dies nicht mehr gelten.
Hier wird nicht nur verlangt, dass die klassische Wirkung invariant ist. Überdies muss auch die effektive Wirkung invariant sein, was aufgrund einer Transformation des Pfadintegralmaßes nicht notwendigerweise der Fall ist, wie es z.B. für eine chirale Transformation in $d = 3+1$ gezeigt wurde [18]. Man spricht in diesem Fall von der chiralen Anomalie.
Ein weiterer Fall, der eintreten kann, ist der, dass im Gegensatz zur Lagrangedichte der Grundzustand einer Theorie nicht mehr invariant ist unter eine Symmetrietransformation. Dieses Phänomen wird als spontane Symmetriebrechung bezeichnet. Ein Ordnungsparameter, welcher die spontane chirale Symmetriebrechung kennzeichnet, ist das chirale Kondensat $\langle\overline{\psi}\psi\rangle|_{m\to 0}$. Das Nichtverschwinden des Kondensats weist somit auf eben jene spontane Symmetriebrechung hin. 1994 zeigten V.P. Gusynin, V.A. Miransky und I.A. Shovkovy durch Auswertung der Weltliniendarstellung des Fermionenpropagators $S(x, y)$, dass im Gegensatz zur $3 + 1$-dimensionalen QED im Falle der paritätsinvarianten Formulierung der QED_{2+1} das chirale Kondensat in einem konstanten Magnetfeld bei einer Temperatur $T = 0$ und einer verschwindenden Ladungsträgerdichte n nicht verschwindet [35]:

$$\langle\overline{\psi}\psi\rangle|_{m\to 0} = -\lim_{x_1\to x_2} trS(x_1, x_2) = -sign(m)\frac{|eB|}{2\pi}. \tag{90}$$

In einem Magnetfeld ist der Grundzustand somit nicht mehr invariant unter einer chiralen Transformation in der QED_{2+1} und führt damit bei $T = 0$ und $n = 0$ zu einer dynamischen Massenerzeugung für Fermionen, selbst bei beliebig schwacher Wechselwirkung [35]. Für endliche Temperaturen bzw. in Anwesenheit einer Ladungsträgerdichte jedoch muss das Magnetfeld einen von T und n abhängigen kritischen Wert überschreiten, damit dieser Effekt, welcher als magnetische Katalyse bezeichnet wird, eintritt [28]. Als physikalischer Grund der magnetischen Katalyse wurde dabei von den drei oben genannten Autoren die magnetfeldbedingte dimensionelle Reduktion, $d \to D-2$, der Fermionendynamik und die damit verbundene Fermionen-Antifermionen-Paarung, die zur Bildung des Kondensats (90) führt, ausgemacht [35].
Im Folgenden wollen wir uns auf die Bestimmung des chiralen Kondensats in inhomogenen Magnetfeldern konzentrieren. Es wird sich dabei zeigen, dass zur Bildung des lokalen chiralen Kondensat im Limes verschwindender Masse in Übereinstimmung mit den Betrachtungen in [35] lediglich die Nullmoden des Dirac-Operators beitragen. Wie bereits in der Einleitung erwähnt, scheint für experimentelle Untersuchungen zur QED_{2+1} in Graphen vor allem das in Kap. 3.2.4 besprochene Kondensat in einem lokalisierten, konstanten bzw. linear ansteigenden Magnetfeld interessant.

3.2 Chirales Kondensat - Analytische Berechnung

3.2.1 Schwellengleichung

Wir werden im Folgenden das chirale Kondensat $\langle\overline{\psi}\psi\rangle|_{m\to 0}$ durch explizite Berechnung der Nullmoden des Dirac-Operators für die Eichpotentiale (42) und (54) in $d = 2+1$ bestimmen. Als Grund-

lage für die Rechnungen dient dabei [15], dessen Ergebnisse im Folgenden vorgestellt werden.
Wir betrachten also die paritätsinvariante Formulierung (89) der QED_{2+1} mit zwei Fermionenspezies mit dem Dirac Operator $\not{D} = \Gamma^\mu D_\mu = \Gamma^\mu(\partial_\mu - ieA_\mu)$. Unter Verwendung der Weyl-Eichung $A_0 = 0$ können wir nun ein Orthonormalsystem aus Eigenzuständen ψ mit Hilfe der entsprechenden Bewegungsgleichung

$$\begin{pmatrix} -i\partial_0 - m & -(D_1 - iD_2) & 0 & 0 \\ -(D_1 + iD_2) & i\partial_0 - m & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -i\partial_0 + m & -(D_1 - iD_2) \\ 0 & 0 & -(D_1 + iD_1) & i\partial_0 + m \end{pmatrix} \psi = 0 \tag{91}$$

bestimmen. Mit dem Ansatz $\psi = e^{-iEt}\psi'$ folgt darüberhinaus:

$$\begin{pmatrix} E + m & D_1 - iD_2 & 0 & 0 \\ D_1 + iD_2 & -E + m & 0 & 0 \\ 0 & 0 & E - m & D_1 - iD_2 \\ 0 & 0 & D_1 + iD_2 & -E - m \end{pmatrix} \psi' = 0. \tag{92}$$

Die Bewegungsgleichung zerfällt gemäß (92) in 2 Blöcke, sodass wir die entsprechenden Lösungen

$$\psi_1 = e^{-iEt} \begin{pmatrix} \phi_1 \\ \phi_2 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} \qquad \psi_2 = e^{-iEt} \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ \chi_1 \\ \chi_2 \end{pmatrix} \tag{93}$$

unabhängig voneinander bestimmen können. Es ergibt sich folglich für den oberen Block

$$\begin{pmatrix} E + m & D_1 - iD_2 \\ D_1 + iD_2 & -E + m \end{pmatrix} \phi = \begin{pmatrix} (E + m)\phi_1 + (D_1 - iD_2)\phi_2 \\ (D_1 + iD_2)\phi_1 - (E - m)\phi_2 \end{pmatrix} = 0, \tag{94}$$

der für Energien $E \neq m$ mit dem Ansatz

$$\phi_1 = f(x_1, x_2), \quad \phi_2 = \frac{(D_1 + iD_2)}{E - m} f(x_1, x_2) \tag{95}$$

gelöst wird, falls f gemäß der ersten Zeile die Differentialgleichung

$$(-D_1 + iD_2)(D_1 + iD_2)f = (E^2 - m^2)f \tag{96}$$

erfüllt. Die Funktionen f sollen hierbei auf 1 normiert sein. Es lässt sich ablesen, dass sowohl Zustände mit positiver als auch negativer Energie existieren. Die Lösung dieser Differentialgleichung wird uns im Folgenden nicht interessieren. Vielmehr interessiert uns die Bestimmung der Schwellenzustände mit der Energie $|E| = \pm m$. Doch zunächst normieren wir noch die erhalten Zustände ψ_1 gemäß:

$$\begin{aligned} \int \psi_1^\dagger \psi_1 d^2x &= \underbrace{\int f^* f d^2x}_{=1} + \frac{1}{(E-m)^2} \int (D_1^* - iD_2^*) f^* (D_1 + iD_2) f d^2x \\ &= 1 + \frac{1}{(E-m)^2} \int f^* \underbrace{(-D_1 + iD_2)(D_1 + iD_2) f}_{\overset{(96)}{=}(E^2 - m^2)f} d^2x \\ &= 1 + \frac{E^2 - m^2}{(E-m)^2} = \frac{2E}{E-m}. \end{aligned} \tag{97}$$

Hierbei haben wir von der ersten zur zweiten Zeile partiell integriert. Wir teilen folglich die ψ_1 durch $\sqrt{2E/(E-m)}$ und erhalten mittels der Ersetzung $E \to \pm|E|$ die normierten Zustände der Teilchen der Masse $-m$:

$$\psi_1^{(\pm)} = e^{\mp i|E|t}\sqrt{\frac{|E| \mp m}{2|E|}} \begin{pmatrix} f \\ \pm\frac{D_1+iD_2}{|E|\mp m} f \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \tag{98}$$

wobei $(+)$ Zustände positiver und $(-)$ negativer Energie kennzeichnet. Die Schwellenzustände $|E| = \pm m$ erhalten wir aus (94) bzw. (96). Diese ergeben sich zu $\phi_2 = 0$ und $\phi_1 = f^{(0)}(x_1, x_2)$, wobei die Schwellengleichung

$$(D_1 + iD_2)f^{(0)} = 0 \tag{99}$$

erfüllt sein muss. Ein analoger Ansatz $\phi_2 = g^{(0)}(x_1, x_2)$ und $\phi_1 = 0$ führt auf die Differentialgleichung $(D_1 - iD_2)g^{(0)} = 0$, deren Lösungen nicht gleichzeitig mit den Lösungen von (99) normierbar sind (vgl. Kap. 3.2.2). Damit erhalten wir als Schwellenzustand

$$\psi_1^{(0-)} = e^{+imt} \begin{pmatrix} f^{(0)} \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}. \tag{100}$$

Der Schwellenzustand positiver Energie $\psi_1^{(0+)}$ wird durch den Vorfaktor $1/\sqrt{|E| - m}$ in (98) ausgeschlossen. Um die gesuchten Eigenzustände für den unteren Block in (92) zu erhalten, müssen wir gemäß (91) lediglich im Endergebnis m durch $-m$ ersetzen, woraus sich für Teilchen der Masse $+m$ die Eigenvektoren

$$\psi_2^{(\pm)} = e^{\mp i|E|t}\sqrt{\frac{|E| \pm m}{2|E|}} \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ f \\ \pm\frac{D_1+iD_2}{|E|\pm m} f \end{pmatrix}, \qquad \psi_2^{(0+)} = e^{-imt} \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ f^{(0)} \\ 0 \end{pmatrix} \tag{101}$$

ergeben, wobei wiederum die Gleichungen (96) und (99) erfüllt sein müssen. Mit Hilfe des gewonnenen Orthonormalsystems aus Eigenzuständen des Dirac-Operators kann der Operator Ψ nun gemäß dem kanonischen Zugang zur Quantenfeldtheorie als Linearkombination dieser Zustände geschrieben werden mit Auf- und Absteigeoperatoren als Koeffizienten:

$$\Psi = \sum_{i=1}^{2} \sum_{n\geq 0} \sum\!\!\!\!\!\!\int_p \left[b_{n,p}\psi_{i,n,p}^{(+)} + d_{n,p}^{\dagger}\psi_{i,n,p}^{(-)} \right]. \tag{102}$$

Hierbei kennzeichnet n die Summation bzw. Integration über sämtliche Energieeigenwerte sowie p eine mögliche Enartung der Eigenzustände, die sich aus (96) bzw. (99) ergibt. Damit können wir den Vakuumerwartungswert $\langle 0|\overline{\Psi}\Psi|0\rangle = \int d^2x \langle 0|\overline{\Psi}(\vec{x})\Psi(\vec{x})|0\rangle$ des Fermionenfeldes unter Ausnutzung

der Eigenschaften der Auf- und Absteigeoperatoren berechnen:

$$\begin{aligned}
\langle 0|\overline{\Psi}\Psi|0\rangle = \langle 0|\Psi^\dagger\Gamma_0\Psi|0\rangle &= \sum_{i,j}\sum_{n,m\geq 0}\sum\!\!\!\!\!\!\int_{p,q}\langle 0|d_{n,p}\psi^{(-),\dagger}_{i,n,p}\Gamma_0 d^\dagger_{m,q}\psi^{(-)}_{j,m,q}|0\rangle \\
&= \sum_{i,j}\sum_{n,m\geq 0}\sum\!\!\!\!\!\!\int_{p,q}\underbrace{\left\{d_{n,p}, d^\dagger_{m,q}\right\}}_{=\delta_{n,m}\delta_{q,p}}\psi^{(-),\dagger}_{i,n,p}\Gamma_0\psi^{(-)}_{j,m,q} \\
&= \sum\!\!\!\!\!\!\int_p \psi^{(0-),\dagger}_{1,0,p}\Gamma_0\psi^{(0-)}_{1,0,p} + \sum_{n>0}\sum\!\!\!\!\!\!\int_p\left(\psi^{(-),\dagger}_{1,n,p}\Gamma_0\psi^{(-)}_{1,n,p} + \psi^{(-),\dagger}_{2,n,p}\Gamma_0\psi^{(-)}_{2,n,p}\right) \\
&= \sum\!\!\!\!\!\!\int_p |f^{(0)}_p|^2 + \frac{m}{|E|}\sum_{n>0}\sum\!\!\!\!\!\!\int_p\left(|f_{n,p}|^2 + \frac{1}{(|E|^2-m^2)}(D_1^* - iD_2^*)f^*_{n,p}(D_1+iD_2)f_{n,p}\right) \\
&= \sum\!\!\!\!\!\!\int_p |f^{(0)}_p|^2 + \frac{2m}{|E|}\sum_{n>0}\sum\!\!\!\!\!\!\int_p |f_{n,p}|^2
\end{aligned} \tag{103}$$

Von der zweiten zur dritten Zeile wurde ausgenutzt, dass die Eigenvektoren der Fermionenspezies 1 orthogonal auf denen der Spezies 2 stehen und, dass (102) aufgrund der Vorfaktoren in (98) bzw. (101) für die Fermionenspezies 1 den negativen und für 2 den positiven Schwellenzustand beinhaltet. Außerdem haben wir das integrierte Kondensat betrachtet, weshalb wir im letzten Schritt nach einer partiellen Integration Gleichung (96) ausnutzen konnten. Somit erhalten wir im chiralen Limes für das lokale Kondensat:

$$\langle\overline{\psi}\psi\rangle(\vec{x})|_{m\to 0} := \langle 0|\overline{\Psi}\Psi|0\rangle(\vec{x})|_{m\to 0} = -sign(m)\sum\!\!\!\!\!\!\int_p |f^{(0)}_p(\vec{x})|^2. \tag{104}$$

Das $-sign(m)$ resultiert hierbei aus der möglichen Vertauschbarkeit der Fermionflavour und damit ihrer Massen bzw. Schwellenzustände.
Somit können wir das chirale Kondensat mit Hilfe der Schwellengleichung (99) und Gleichung (104) für unsere Potentiale (42) und (54) explizit berechnen. Für diese müssen wir folglich zunächst die Gleichung

$$(\partial_1 + i\partial_2 + A_2(x_1))f^{(0)}_p(\vec{x}) = 0 \tag{105}$$

auswerten. Mit dem Ansatz $f^{(0)}_p(\vec{x}) = e^{ipx_2}g^{(0)}_p(x_1)$ erhalten wir darüberhinaus die Differentialgleichung

$$\partial_1 g^{(0)}_p(x_1) = (p - A_2(x_1))g^{(0)}_p(x_1) \tag{106}$$

und durch Integration die bekannte Lösung der Schwellengleichung (99)[15]:

$$f^{(0)}_p(\vec{x}) = e^{ipx_2}e^{\int^{x_1} dx_1(p-A_2(x_1))}. \tag{107}$$

3.2.2 Pseudo-Magnetfeld in Graphen

In Kap. 3.2.4 werden wir das chirale Kondensat für das in 2.6 besprochene lokalisierte, linear ansteigende Magnetfeld berechnen. Wie bereits erwähnt kann dieses durch Anwendung mechanischer Spannung als Pseudo-Eichpotential bzw. Pseudo-Magnetfeld B_P in Graphen erzeugt werden. Signifikanter Unterschied zu einem realen B-Feld stellt dabei die Tatsache dar, dass das Pseudo-Eichpotential an den beiden inequivalenten Dirac-Punkten der Brillouinzone ein entgegengesetztes

Vorzeichen aufweist [6]. Das Vorzeichen des Magnetfeldes an den Dirac-Punkten kann dabei durch Inversion des Verschiebungsfeldes $u(\vec{x})$, welches die deformationsbedingte Auslenkung der Gitteratome gegenüber ihrem ursprünglichen Platz im undeformierten Gitter beschreibt, umgekehrt werden: $\vec{u}(\vec{x}) \to -\vec{u}(\vec{x})$. Das lässt sich z.B. anhand des Beispiel-Verschiebungsfeldes ($E.52$) visualisieren. Für unser konkretes Beispiel 2.6 müsste folglich das Graphen nicht, wie in Abb. 3 zu sehen, gedehnt, sondern gestaucht werden. In Anhang E sind kurz die für uns wichtigsten Informationen zur QED_{2+1} und Pseudomagnetfeldern in Graphen zusammengefasst. Ausführlichere Informationen sind z.B. in den Reviews [38, 6] zu finden.
Für eine konkrete Berechnung des chiralen Kondensats bedeutet die Vorzeichenumkehr des Eichpotentials an den beiden Dirac-Punkten, die in unserem Fall jeweils einem Fermionflavour entsprechen, dass in *einem* der beiden Unterblöcke von (91) D_1 durch D_1^* bzw. D_2 durch D_2^* ersetzt werden müssen. Als Analogon von (91) ergibt sich dementsprechend

$$\begin{pmatrix} -i\partial_0 - m & -(D_1 - iD_2) & 0 & 0 \\ -(D_1 + iD_2) & i\partial_0 - m & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -i\partial_0 + m & -(D_1^* - iD_2^*) \\ 0 & 0 & -(D_1^* + iD_1^*) & i\partial_0 + m \end{pmatrix} \psi = 0 \tag{108}$$

Ausgehend von der Annahme, dass das paritätsbrechende Pseudo-Magnetfeld in einer a priori paritätserhaltenden Theorie induziert wird[5], kann die Rechnung aus dem vorhergehenden Abschnitt mit dieser Ersetzung analog durchgeführt werden. Für das Endergebnis folgen jedoch signifikante Unterschiede. In der ursprünglichen Form (91) lauten die normierbaren Nullmoden

$$\psi_1^{(0-)} = e^{+imt} \begin{pmatrix} f^{(0)} \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \psi_2^{(0+)} = e^{-imt} \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ f^{(0)} \\ 0 \end{pmatrix}, \quad (D_1 + iD_2) f^{(0)} = 0, \tag{109}$$

welche die Normierbarkeit der ebenfalls möglichen Nullmoden

$$\psi_1^{(0+)} = e^{-imt} \begin{pmatrix} 0 \\ g^{(0)} \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \psi_2^{(0-)} = e^{+imt} \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ g^{(0)} \end{pmatrix}, \quad (D_1 - iD_2) g^{(0)} = 0 \tag{110}$$

ausschließen [1, 15]. Für (110) hingegen ergeben sich die normierbaren Nullmoden

$$\psi_1^{(0-)} = e^{+imt} \begin{pmatrix} f_a^{(0)} \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \psi_2^{(0-)} = e^{+imt} \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ g_b^{(0)} \end{pmatrix}, \quad (D_1 + iD_2) f_a^{(0)} = 0, \quad (D_1^* - iD_2^*) g_b^{(0)} = 0, \tag{111}$$

wohingegen

$$\psi_2^{(0+)} = e^{-imt} \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ f_b^{(0)} \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \psi_1^{(0+)} = e^{-imt} \begin{pmatrix} 0 \\ g_a^{(0)} \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad (D_1^* + iD_2^*) f_b^{(0)} = 0, \quad (D_1 - iD_2) g_a^{(0)} = 0 \tag{112}$$

[5] Die Paritätstransformation des Graphengitters bzw. des entsprechenden Tight-Binding-Hamiltonoperators, welche das Gitter an *beiden* Achsen spiegelt und A und B Untergitter sowie die beiden Dirac-Punkte $K_\pm$ vertauscht, verlangt die Einführung von Fermionenspezies mit entgegengesetzten Massen (vgl. [38]).

nicht normierbar sind. Somit fließen in diesem Fall *beide* Nullmoden (112) in die Berechnung (103) ein und es ergibt sich entsprechend für die gewählte Vorzeichenkonvention das doppelte chirale Kondensat

$$\langle\overline{\psi}\psi\rangle|_{m\to 0} = \sum\!\!\!\!\!\!\int_p \left(|f_{a,p}^{(0)}|^2 + |g_{b,p}^{(0)}|^2\right). \tag{113}$$

Das Ergebnis ist nun jedoch abhängig von der Wahl der Vorzeichen der Masse und des Pseudo-Magnetfeldes in den Unterblöcken von (108): wir können auch im oberen Block $+m$ statt $-m$ wählen oder D_1 durch D_1^* bzw. D_2 durch D_2^* ersetzen, usw.. Um die Lösungen der anderen Vorzeichenkombinationen zu erhalten, muss beachtet werden, dass die Vorzeichenumkehr des Eichpotentials lediglich Auswirkungen auf die Differentialgleichungen in (111)/(112) hat, nicht jedoch zulässige positive/negative Schwellenzustände mit negativen/positiven eines Fermionflavours vertauscht. Der Austausch $+m \leftrightarrow -m$ hingegen hat keine Auswirkungen auf die Differentialgleichungen, jedoch werden zulässige positive und negative Schwellenzustände der Fermionflavour aufgrund des Vorzeichenwechsels in den Faktoren $1/\sqrt{|E| \pm m}$ ausgetauscht (vgl. mit Bemerkung nach Gleichung (100)). In der folgenden Tabelle sind die Analoga von (111)(zweite Zeile) und (112)(dritte Zeile) für die weiteren möglichen Vorzeichenkombinationen mit dem entsprechendem Kondensat angegeben. Die Zellen enthalten dabei den jeweiligen Schwellenzustand und daneben die zugehörige Differentialgleichung. In der ersten Zeile sind dabei die Vorzeichen von Masse m und Pseudo-Eichpotential A im *oberen* Block der Analoga von (108) angegeben. Der untere Block beinhaltet entsprechend die entgegengesetzten Vorzeichen. (108) bzw. (111)/(112) selbst würde demzufolge der ersten Spalte entsprechen.

Tabelle 1: Chirales Kondensat im Pseudo-Magnetfeld in Graphen

$-m$, $+A$	$+m$, $+A$	$-m$, $-A$	$+m$, $-A$
$\psi_1^{(0-)}$; $(D_1 + iD_2)f_a^{(0)} = 0$ $\psi_2^{(0-)}$; $(D_1^* - iD_2^*)g_b^{(0)} = 0$ normierbar	$\psi_1^{(0+)}$; $(D_1 + iD_2)f_a^{(0)} = 0$ $\psi_2^{(0+)}$; $(D_1^* - iD_2^*)g_b^{(0)} = 0$ normierbar	$\psi_1^{(0-)}$; $(D_1^* + iD_2^*)f_a^{(0)} = 0$ $\psi_2^{(0-)}$; $(D_1 - iD_2)g_b^{(0)} = 0$ nicht normierbar	$\psi_1^{(0+)}$; $(D_1^* + iD_2^*)f_a^{(0)} = 0$ $\psi_2^{(0+)}$; $(D_1 - iD_2)g_b^{(0)} = 0$ nicht normierbar
$\psi_2^{(0+)}$; $(D_1^* + iD_2^*)f_b^{(0)} = 0$ $\psi_1^{(0+)}$; $(D_1 - iD_2)g_a^{(0)} = 0$ nicht normierbar	$\psi_2^{(0-)}$; $(D_1^* + iD_2^*)f_b^{(0)} = 0$ $\psi_1^{(0-)}$; $(D_1 - iD_2)g_a^{(0)} = 0$ nicht normierbar	$\psi_2^{(0+)}$; $(D_1 + iD_2)f_b^{(0)} = 0$ $\psi_1^{(0+)}$; $(D_1^* - iD_2^*)g_a^{(0)} = 0$ normierbar	$\psi_2^{(0-)}$; $(D_1 + iD_2)f_b^{(0)} = 0$ $\psi_1^{(0-)}$; $(D_1^* - iD_2^*)g_a^{(0)} = 0$ normierbar
$\langle\overline{\psi}\psi\rangle = \sum\!\!\!\!\!\!\int_p \left(\lvert f_{a,p}^{(0)}\rvert^2 + \lvert g_{b,p}^{(0)}\rvert^2\right)$	$\langle\overline{\psi}\psi\rangle = 0$	$\langle\overline{\psi}\psi\rangle = 0$	$\langle\overline{\psi}\psi\rangle = -\sum\!\!\!\!\!\!\int_p \left(\lvert f_{b,p}^{(0)}\rvert^2 + \lvert g_{a,p}^{(0)}\rvert^2\right)$

Als Konsequenz kann sich somit für das lokalisierte, linear ansteigende Pseudo-Magnetfeld je nach Vorzeichenkombination entweder eine Verdopplung des chiralen Kondensats im Vergleich zum realen Magnetfeld ergeben oder es ist kein Kondensat beobachtbar. Durch Abbildung des Tight-Binding-Hamiltonoperators auf die paritätsinvariante Dirac-Gleichung der Form (91) kann zwar eine Aussage getroffen werden, welches Vorzeichen das B-Feld im jeweiligen Unterblock hat [6]. Selbiges ist jedoch unter den getroffenen Annahmen für das Vorzeichen der Masse im jeweiligen Block nicht möglich. Eine (Um-)Besetzung der Nullmoden kann somit durch Umkehrung des Verschiebungsfeldes erreicht werden. Entsprechend ist nur für eine Richtung von $\vec{u}(\vec{x})$ ein chirales Kondensat vorhanden. Dies stellt vor allen Dingen aus experimenteller Sicht eine interessante Konsequenz dar (vgl. Kap. 3.4) und muss entsprechend bei den Betrachtungen in 3.2.4 berücksichtigt werden.

3.2.3 Sinusförmiges B-Feld

Wir verwenden im Folgenden die Bezeichnungen $x = x_1$ und $y = x_2$. Als Lösung für die Nullmode $f^{(0)}(\vec{x})$ im Falle des Sinusodialen B-Feldes (42) ergibt sich aus (107):

$$f^{(0)}(\vec{x}) = e^{ipy}e^{px}e^{-\frac{\overline{B}x^2}{2}}e^{B_1\left(\frac{\lambda_B}{2\pi}\right)^2\cos\left(\frac{2\pi}{\lambda_B}x\right)} = e^{ipy}e^{-\frac{(\overline{B}x-p)^2}{2\overline{B}}}e^{\frac{p^2}{2\overline{B}}}e^{B_1\left(\frac{\lambda_B}{2\pi}\right)^2\cos\left(\frac{2\pi}{\lambda_B}x\right)}. \tag{114}$$

Vor der Anwendung von (104) müssen wir $f^{(0)}(\vec{x})$ noch normieren, was für unser Eichpotential nicht analytisch möglich ist. Wir beschränken die y-Richtung zunächst auf einen Raumbereich der Länge L_y und erhalten:

$$f^{(0)}(\vec{x}) = \frac{1}{\sqrt{L_y}}\frac{e^{ipy}e^{-\frac{(\overline{B}x-p)^2}{2\overline{B}}}e^{B_1\left(\frac{\lambda_B}{2\pi}\right)^2\cos\left(\frac{2\pi}{\lambda_B}x\right)}}{\sqrt{\int_{-\infty}^{\infty}dx'e^{-\frac{(\overline{B}x'-p)^2}{\overline{B}}}e^{2B_1\left(\frac{\lambda_B}{2\pi}\right)^2\cos\left(\frac{2\pi}{\lambda_B}x'\right)}}} \tag{115}$$

Für das chirale Kondensat ergibt sich somit:

$$\begin{aligned}\langle\overline{\psi}\psi\rangle(x)|_{m\to 0} &\overset{(104)}{=} -\frac{sign(m)}{L_y}\sum_p \frac{e^{-\frac{(\overline{B}x-p)^2}{\overline{B}}}e^{2B_1\left(\frac{\lambda_B}{2\pi}\right)^2\cos\left(\frac{2\pi}{\lambda_B}x\right)}}{\int_{-\infty}^{\infty}dx'e^{-\frac{(\overline{B}x'-p)^2}{\overline{B}}}e^{2B_1\left(\frac{\lambda_B}{2\pi}\right)^2\cos\left(\frac{2\pi}{\lambda_B}x'\right)}} \\ &\overset{L_y\to\infty}{=} -sign(m)e^{2B_1\left(\frac{\lambda_B}{2\pi}\right)^2\cos\left(\frac{2\pi}{\lambda_B}x\right)}\int_{-\infty}^{\infty}\frac{dp}{2\pi}\frac{e^{-\frac{(\overline{B}x-p)^2}{\overline{B}}}}{\int_{-\infty}^{\infty}dx'e^{-\frac{(\overline{B}x'-p)^2}{\overline{B}}}e^{2B_1\left(\frac{\lambda_B}{2\pi}\right)^2\cos\left(\frac{2\pi}{\lambda_B}x'\right)}}.\end{aligned} \tag{116}$$

Das Integral im Nenner kann für kleine Wellenlängen des B-Feldes, so dass $2B_1\left(\lambda_B/2\pi\right)^2 \ll 1$ gilt, genähert werden, indem man $\exp\left(2B_1\left(\lambda_B/2\pi\right)^2\cos\left(2\pi x'/\lambda_B\right)\right)$ bis zur 0.ten Ordnung entwickelt. Damit können die beiden sich ergebenden Gaußschen Integrale exakt berechnet werden und es ergibt sich für unsere Näherung:

$$\langle\overline{\psi}\psi\rangle(x)|_{m\to 0} = -\frac{sign(m)}{2\pi}\overline{B}e^{2B_1\left(\frac{\lambda_B}{2\pi}\right)^2\cos\left(\frac{2\pi}{\lambda_B}x\right)} \quad \overset{2B_1(\lambda_B/2\pi)^2\to 0}{\longrightarrow} \quad -\frac{sign(m)}{2\pi}\overline{B}. \tag{117}$$

Für kleine Wellenlängen variiert das chirale Kondensat folglich um das mittlere B-Feld $\overline{B}$. Für den Fall asymptotisch großer Wellenlängen und großen Flusses kann (116) mit Hilfe der Sattelpunktsmethode analytisch gelöst werden (siehe Anhang B.2). Als Resultat zeigt sich hier die Proportionalität des chiralen Kondensats zum lokalen B-Feld:

$$\langle\overline{\psi}\psi\rangle(x)|_{m\to 0} = -\frac{sign(m)}{2\pi}\left(\overline{B} + B_1\cos\left(\frac{2\pi}{\lambda_B}x\right)\right) = -\frac{sign(m)}{2\pi}B(x). \tag{118}$$

Es konnte folglich die Aussage aus [15], dass das chirale Kondensat für unendlich großen Fluss proportional zum lokalen Magnetfeld ist, sowie auf alternativem Wege Ergebnisse aus Kapitel 2.5 für den spinoriellen WLEW bestätigt werden.
Zum Abschluss dieses Abschnittes wollen wir (116) numerisch integrieren. Mit einfachen Substitutionen lässt sich diese Gleichung auf eine Form bringen mit der sie z.B. mit Hilfe von MATHEMA-

TICA numerisch integriert werden kann:

$$\begin{aligned}\langle\overline{\psi}\psi\rangle(x)|_{m\to 0} &\overset{(B.15)}{=} -\frac{sign(m)}{2\pi}e^{2B_1\left(\frac{\lambda_B}{2\pi}\right)^2\cos\left(\frac{2\pi}{\lambda_B}x\right)}\sqrt{B} \\ &\cdot\int_{-\infty}^{\infty}dp\frac{1}{\int_{-\infty}^{\infty}dx'e^{-\left(\frac{\lambda_B}{2\pi}\right)^2\left\{\left[\sqrt{B}x'-p\right]^2-p^2-2B_1\cos\left(x'+\frac{\lambda_B}{2\pi}x\right)\right\}}}.\end{aligned} \tag{119}$$

In Abb. 6 sind die Ergebnisse der Integration dargestellt. Es zeigen sich wie erwartet die Beobachtungen der obigen Näherungen. Bei $x_{\mathrm{CM}} = \frac{\lambda_B}{4}$ zeigt das chirale Kondensat im mittleren Wellenlängenbereich bei $\lambda_B \approx 6$ ein Maximum.
Die Ergebnisse werden wir in Kap. 3.3 zur Beurteilung der mit der Weltliniennumerik extrapolierten Resultate heranziehen. Wir versprechen uns davon Rückschlüsse ziehen zu können, ob das von uns verwendete Verfahren zur Extrapolation des spinoriellen WLEW im Bereich großer T-Werte akzeptable Ergebnisse liefert.

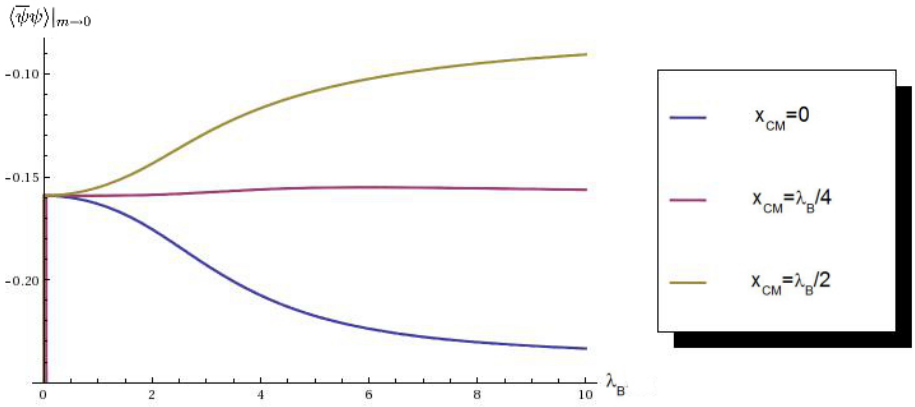

Abbildung 6: Mit Hilfe von Gleichung (116) wurde das chirale Kondensat im chiralen Limes bestimmt. Man findet für $x_{\mathrm{CM}} = \frac{\lambda_B}{4}$ im Bereich $\lambda_B \approx 6$ ein Maximum des chiralen Kondensats.

3.2.4 Lokalisiertes B-Feld

Im Fall eines lokalisierten B-Feldes können wir eine analoge Rechnung durchführen. Zu beachten ist hierbei, dass das Feld räumlich begrenzt ist. Um sowohl ein lokalisiertes, konstantes als auch linear ansteigendes B-Feld diskutieren zu können, führen wir einen Parameter $B_{min}\ \epsilon\ [0, B_{max}]$ im Eichpotential (54) ein der zwischen dem linear ansteigendem B-Feld (52)($B_{min} = 0$) und dem konstantem B-Feld ($B_{min} = B_{max}$) vermittelt, womit wir einen Teil der Rechnung simultan durchführen können. Ein entsprechdendes Eichpotential lautet:

$$\begin{aligned}A_y(x) &= \frac{1}{2}x(B'x + 2B_{min})(\Theta(x) - \Theta(x-L)) + \frac{L}{2}(2B_{min} + B'L)\Theta(x-L) \\ &= \frac{1}{2}x\left(\left(\frac{B_{max}-B_{min}}{L}\right)x + 2B_{min}\right)(\Theta_0 - \Theta_L) + \frac{L}{2}(B_{max}+B_{min})\Theta_L,\end{aligned} \tag{120}$$

wobei $B^{'}$ den Anstieg des Magnetfeld charakterisiert und durch $B_{max} = B^{'}L + B_{min}$ wieder die maximale Feldstärke festgelegt wird. Die Nullmoden (107) lauten in diesem Fall

$$\begin{aligned} f^{(0)}(\vec{x}) = e^{ipy}e^{px}e^{-\frac{1}{6}\left(3B_{min}x^2+\left(\frac{B_{max}-B_{min}}{L}\right)x^3\right)(\Theta_0-\Theta_L)} \\ e^{\frac{1}{6}\left(2L^3\left(\frac{B_{max}-B_{min}}{L}\right)-3L^2\left(\frac{B_{max}-B_{min}}{L}\right)x+3L^2B_{min}-6B_{min}Lx\right)\Theta_L}, \end{aligned} \tag{121}$$

welche entsprechend mit dem Nenner

$$\begin{aligned} L_y\Big(\int_{-\infty}^{0} dx\ e^{2px} + \int_0^L dx\ e^{2px}e^{-\frac{1}{3}\left(3B_{min}x^2+\left(\frac{B_{max}-B_{min}}{L}\right)x^3\right)} \\ + e^{\frac{L^2}{3}(2B_{max}-B_{min})}\int_L^{\infty} dx\ e^{(2p-L(B_{max}+B_{min}))x}\Big) \end{aligned} \tag{122}$$

normiert werden müssen. Aus den beiden äußeren Integralen in (122), welche analytisch integriert werden können, folgt hierbei, dass nur für

$$0 < p < \frac{L}{2}(B_{max} + B_{min}) = \Phi\frac{2\pi}{L_y} \tag{123}$$

mit dem Fluss $\Phi = \frac{1}{2\pi}\int d^2xB(x)$ normierbare Nullmoden existieren, was bei der p-Integration des chiralen Kondensats beachtet werden muss.

Konstantes B-Feld

Betrachten wir also das konstante B-Feld $B_{min} = B_{max} = B$, so ergibt sich mit $x = kL$

$$\begin{aligned} \langle\overline{\psi}\psi\rangle(k)|_{m\to 0} \overset{(104)}{=} -\frac{sign(m)}{2\pi}e^{-BL^2k^2(\Theta_0-\Theta_L)}e^{-2BL^2\left(k-\frac{1}{2}\right)\Theta_L}\cdot B\sqrt{B}L \\ \cdot\int_0^1 dp\frac{e^{2BL^2pk}}{\frac{1}{2\sqrt{B}Lp}+\frac{\sqrt{\pi}}{2}e^{BL^2p^2}\left(Erf\left[\sqrt{B}L(1-p)\right]+Erf\left[\sqrt{B}Lp\right]\right)+\frac{e^{BL^2(2p-1)}}{2\sqrt{B}L(1-p)}}, \end{aligned} \tag{124}$$

wobei wir hier die Substitution $p \to BLp$ vorgenommen haben um das p-Integral als Funktion von $\sqrt{B}L$ auffassen zu können. Das numerisch integrierte Kondensat ist in Abb. 7 dargestellt.
Auch in diesem speziellen Fall eines lokalisierten B-Feldes lässt sich die Aussage aus [15] bestätigen, dass für großen Fluss $BL \to \infty$ das chirale Kondensat proportional zum lokalen B-Feld ist. Um das einzusehen verwenden wir die asymptotische Entwicklung der Fehlerfunktion für $\sqrt{B}L \to \infty$ bis zur 2.Ordnung:

$$Erf\left[\sqrt{B}L(1-p)\right]+Erf\left[\sqrt{B}Lp\right] = 2 + \frac{e^{-(1-p)^2BL^2}}{(p-1)\sqrt{\pi}\sqrt{B}L} - \frac{e^{-p^2BL}}{p\sqrt{\pi}\sqrt{B}L}. \tag{125}$$

Dadurch heben sich die Terme im Nenner weg und wir erhalten nach Ausführung der p-Integration

$$\begin{aligned} \langle\overline{\psi}\psi\rangle(k)|_{m\to 0} = -\frac{sign(m)}{2\pi}e^{-BL^2k^2(\Theta_0-\Theta_L)}e^{-2BL^2\left(k-\frac{1}{2}\right)\Theta_L}\frac{B}{2} \\ \cdot e^{BL^2k^2}\left(Erf\left[\sqrt{B}L(1-k)\right]+Erf\left[\sqrt{B}Lk\right]\right) \end{aligned} \tag{126}$$

Im Limes $\sqrt{B}L \to \infty$ gehen die Fehlerfunktionen in Stufenfunktionen über und wir erhalten:

$$\langle\overline{\psi}\psi\rangle(k)|_{m\to 0} \overset{\sqrt{B}L\to\infty}{\to} -\frac{sign(m)}{2\pi}B(\Theta_0-\Theta_L) = -\frac{sign(m)}{2\pi}\cdot B(k). \tag{127}$$

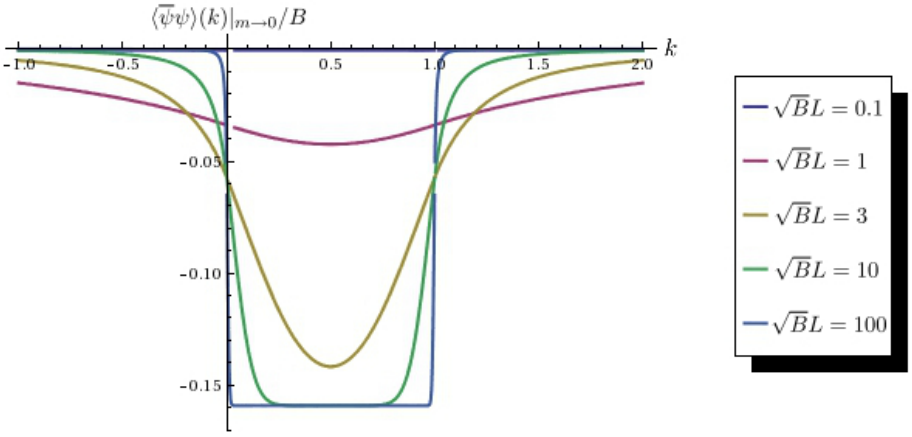

Abbildung 7: Mit Hilfe von Gleichung (124) wurde das fermionische Kondensat im chiralen Limes für verschiedene $\sqrt{B}L$ über der dimensionslosen Ortskoordinate k aufgetragen. Für $\sqrt{B}L > 1$ bleibt der Wert des Kondensats an den Stellen $k = 0$ und $k = 1$ nahezu konstant.

Wir wollen im Folgenden das Abfallverhalten des chiralen Kondensates außerhalb des Magnetfeldes für $k \to \pm\infty$ untersuchen. Aufgrund der Symmetrie des Magnetfeldes können wir unsere Untersuchungen auf $k \to +\infty$ beschränken. Wir betrachten also ins unserem Fall

$$\begin{aligned} & e^{-2BL^2k} \int_0^1 dp \frac{e^{2BL^2pk}}{\frac{1}{2\sqrt{B}Lp} + e^{BL^2p^2}\frac{\sqrt{\pi}}{2}(Erf[L(1-p)] - Erf[Lp]) + \frac{e^{BL^2(2p-1)}}{2\sqrt{B}L(1-p)}} \\ = & e^{-2BL^2k} \int_0^1 dp\ \alpha(p) \cdot e^{\beta(p)k} \end{aligned} \tag{128}$$

für $k > 1$. Es handelt sich bei (128) um ein Integral vom Laplace-Typ. Eine geeignete Methode zur Untersuchung der Asymptotik stellt in unserem Fall die partielle Integration dar[3]. Dazu schreiben wir das Integral als:

$$\int_0^1 dp \frac{\alpha(p)}{\beta'(p)k} \cdot \frac{d}{dp}\left(e^{\beta(p)k}\right) = \frac{1}{k}\left[\frac{\alpha(p)}{\beta'(p)}e^{\beta(p)k}\right]_0^1 - \frac{1}{k}\int_0^1 dp \frac{d}{dp}\left(\frac{\alpha(p)}{\beta'(p)}\right)e^{\beta(p)k}. \tag{129}$$

Setzen wir die partielle Integration iterativ fort, so erhalten wir mit $\beta(p) = 2BL^2p$

$$e^{-2BL^2k}\int_0^1 dp\ \alpha(p)e^{\beta(p)k} = \sum_{n=0}^{s}(-1)^n\frac{Z_n(k)}{(2BL^2)^{n+1}} + (-1)^{s+1}\frac{e^{-2BL^2k}}{(2BL^2k)^{s+1}}\int_0^1 dp\ \alpha^{(s+1)}(p)e^{2BL^2pk}$$

$$Z_n(k) = \alpha^{(n)}(1)\frac{1}{k^{n+1}} - \alpha^{(n)}(0)\frac{e^{-2BL^2k}}{k^{n+1}} = \frac{\alpha^{(n)}(0)}{k^{n+1}}\left(\frac{\alpha^{(n)}(1)}{\alpha^{(n)}(0)} - e^{-2BL^2k}\right). \tag{130}$$

Hierbei sind die Funktionen $\alpha^{(n)}(0)$ bzw. $\alpha^{(n)}(1)$ nur noch von $\sqrt{B}L$ abhängig und spielen somit für das asymtotische k-Verhalten eine geringe Rolle. Wir geben an dieser Stelle als Beispiel die ersten

drei Koeffizenten $Z_n(k)$ an:

$$\begin{aligned} Z_0(k) &= 0 \\ Z_1(k) &= -\frac{2\sqrt{B}L}{k^2}(e^{-BL^2} - e^{-2kBL^2}) \\ Z_2(k) &= \frac{1}{k^3}(4e^{-2BL^2}\sqrt{B}L\left(-1 + 2e^{BL^2}BL^2 - e^{BL^2}\sqrt{\pi}\sqrt{B}L\mathrm{Erf}[\sqrt{B}L]\right) \\ &\quad - e^{-2kBL^2}\left(-4e^{-BL^2}\sqrt{B}L - 4\sqrt{\pi}BL^2\mathrm{Erf}[\sqrt{B}L]\right)) \end{aligned} \tag{131}$$

Es lässt sich hieraus bereits ablesen, dass für $k \to \infty$ der $1/k^2$-Term dominieren wird. Es liegt somit im Vergleich zur magnetischen Stufe im Fall skalarer Felder, deren effektive Lagrangedichte in [22] untersucht wurde, eine Besonderheit vor. Dort ergab sich ein exponentieller Abfall der effektiven Lagrangedichte im Außenraum des Magnetfeldes, der sich im Weltlinien-Bild mit der Beobachtung deckt, dass für zunehmenden Abstand zum Magnetfeld exponentiell weniger Loopensembleanteile zur effektiven Lagrangedichte beitragen. Es liegt nahe, dass für fermionische Felder der geminderte Abfall daraus resultiert, dass für einen wachsenden Abstand zum Magnetfeld der Anteil des Loopensembles im Magnetfeld zwar exponentiell abfällt, die Beiträge, welche die Loopemsembleanteile zum chiralen Kondensat liefern für Fermionen jedoch exponentiell ansteigen.
Um festzustellen für welche Abstände zum Magnetfeld der $1/k^2$-Abfall dominant wird, stellt sich ein doppelt-logarithmischer Plot des chiralen Kondensats (126) als nützlich heraus. Der entsprechende Bereich, in dem der $\exp(-2kBL^2)/k^2$-Term in $Z_1(k)$ bzw. die restlichen Ordnungen der Entwicklung (130) vernachlässigbar werden, ist dann entsprechend durch einen linearen Abfall von $Log(-\langle\overline{\psi}\psi\rangle/B)$ mit dem Anstieg -2 gekennzeichnet, der sich wie erwartet in Abb.8 für verschiedene $\sqrt{B}L$ beobachten lässt[6].

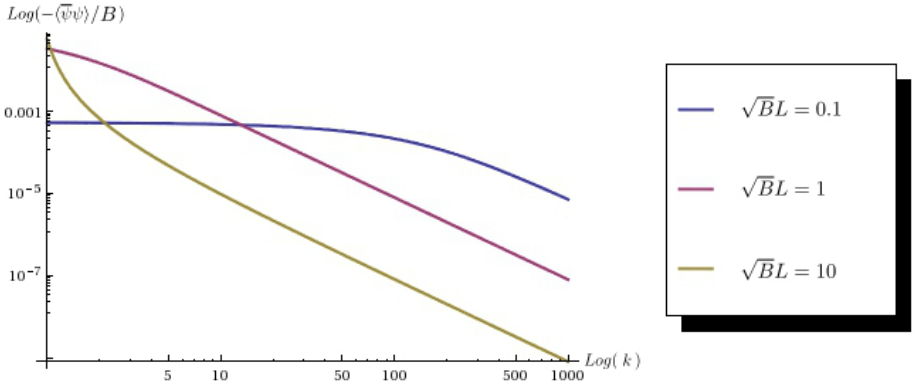

Abbildung 8: Es wurde für verschiedene $\sqrt{B}L$ der Logarithmus des chiralen Kondensats (124) über dem Logarithmus der dimensionslosen Ortskoordinate k aufgetragen. In Abhängigkeit der Größe des Flusses stellt sich bei verschiedenen k jeweils ein lineares Abfallen mit dem Anstieg -2 ein.

Es ist weiterhin zu erkennen, dass für Werte $\sqrt{B}L \ll 1$ das $1/k^2$ Verhalten erst für verhältnismäßig große k-Werte einsetzt. Der Abfall geschieht dabei, wie für $\sqrt{B}L = 0.1$ zu sehen ist, in einem großen k-Bereich deutlich langsamer als mit $1/k^2$. Da für $\sqrt{B}L \to 0$ sämtliche Koeffizienten in (130) verschwinden, geht in diesem Fall $Log(-\langle\overline{\psi}\psi\rangle/B)$ gegen 1 für sämtliche k-Werte.

[6]Durch einen doppelt-logarithmischen Plot des chiralen Kondensats für das uniforme, semilokalisierte Magnetfeld $B(x) = B/\cosh^2(x/\lambda)$ aus [15] lässt sich in diesem Fall bei endlichem Fluss ebenfalls ein $1/k^2$-Abfall beobachten.

Für die verwendeten Werte $\sqrt{B}L \geq 1$ wird das Abfallverhalten hingegen in ähnlichen Bereichen dominant. Es zeigt sich hierbei, dass für $\sqrt{B}L \to \infty$ die $Log(-\langle\overline{\psi}\psi\rangle/B)$-Werte zunehmend schneller abfallen und der $1/k^2$-Abfall bei ähnlichen k-Werten erreicht wird. Das wiederum deckt sich mit der obigen Beobachtung, dass im Limes unendlichen Flusses das chirale Kondensat außerhalb des Magnetfeldes verschwinden muss.
Ebenfalls lässt sich feststellen bis zu welcher Ordnung n partiell integriert werden sollte, damit die Grenzterme in (130) in einem gewünschten k-Bereich das Abfallverhalten des chiralen Kondensates gut wiederspiegeln. Dazu plotten wir das Verhältnis aus den Grenztermen der jeweiligen Ordnung und dem chiralen Kondensat:

$$G_s(k) := \frac{-\frac{sign(m)}{2\pi} B\sqrt{B}Le^{BL^2}\sum_{n=0}^{s}(-1)^n\frac{Z_n(k)}{(2BL^2)^{n+1}}}{\langle\overline{\psi}\psi\rangle(k)|_{m\to 0}}. \tag{132}$$

Entprechend ist eine gute Approximation erreicht, wenn das Verhältnis nahe 1 liegt. Es zeigt sich hierbei, dass für einen kleinen Fluss $BL^2 < 1$ in Übereinstimmung mit (131) höhere Ordnungen notwendig sind um in Bereichen $k \leq 10$ eine gute Approximation des Abfallverhaltens zu erreichen.

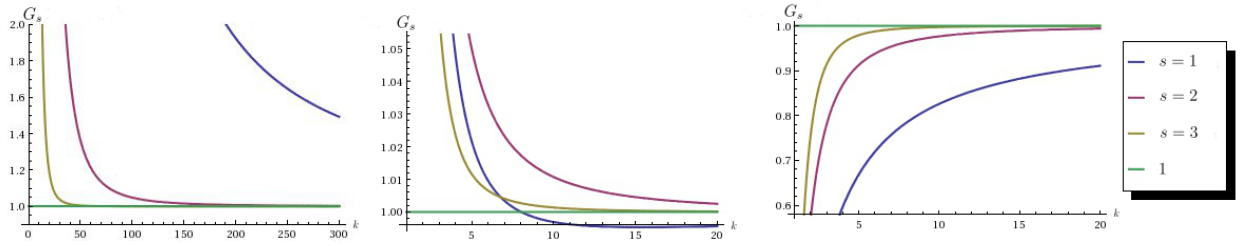

Abbildung 9: Für bis zu $s = 3$ in (132) wurde das Verhältnis aus den Grenztermen und dem chiralen Kondensat (124) über der dimensionslosen Ortskoordinate k aufgetragen für $\sqrt{B}L = 0.1$ (oben links), $\sqrt{B}L = 1.0$ (oben rechts), $\sqrt{B}L = 10.0$ (unten). Höhere Ordnungen der Entwicklung (130) approximieren das chirale Kondensat im Außenraum des Magnetfeldes für kleinere k besser.

Linear ansteigendes B-Feld

Für das lineare ansteigende B-Feld erhalten wir aus (121), (122) und (123) mit $B_{min} = 0$ und $x = kL$ das Kondensat

$$\begin{aligned}\langle\overline{\psi}\psi\rangle(k)|_{m\to 0} = &-\frac{sign(m)}{2\pi}e^{-\frac{B_{max}L^2}{3}k^3(\Theta_0-\Theta_L)}e^{-\frac{B_{max}L^2}{3}(3k-2)\Theta_L}\frac{B_{max}}{2}\\ &\cdot\int_0^1 dp\frac{e^{B_{max}L^2pk}}{\frac{1}{B_{max}L^2p}+\int_0^1 dx' e^{B_{max}L^2px'}e^{-\frac{B_{max}L^2}{3}x'^3}-\frac{e^{B_{max}L^2(p-\frac{1}{3})}}{B_{max}L^2(p-1)}}.\end{aligned} \tag{133}$$

Für konkrete Betrachtungen von Pseudo-Magnetfeldern in Graphen müssen entsprechend die Erkenntnisse aus 3.2.2 beachtet werden. Das Integral kann mit Hilfe von MATHEMATICA numerisch integriert werden. Die Ergebnisse der Integration sind in Abb. 10 dargestellt, wobei die Bezeichung $B := B_{max}$ verwendet wurde.
Auch in diesem Fall ist zu erkennen, dass das chirale Kondensat für endlichen Fluss außerhalb des Magnetfeldes nicht verschwindet. Das Abfallverhalten kann hierbei analog zum konstanten, lokalisierten Magnetfeld untersucht werden.

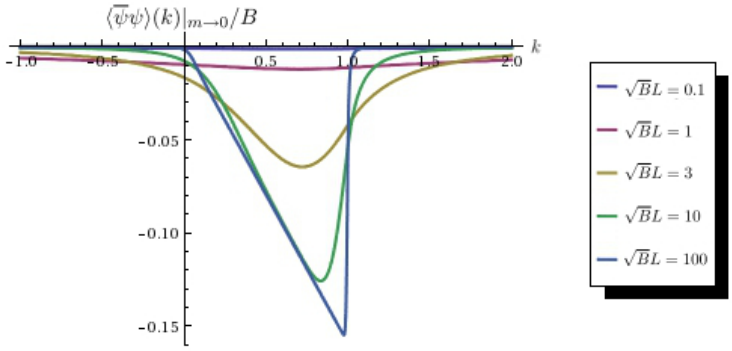

Abbildung 10: Es ist das chirale Kondensat (133) mit $B := B_{max}$ im chiralen Limes über der dimensionslosen Ortskoordinate k im Magnetfeld dargestellt. Für große $\sqrt{B}L$ bzw. großen Fluss zeigt sich wie erwartet, dass das Kondensat proportional dem lokal konstanten B-Feld $B(k) = B \cdot (1-k)$ ist.

Dabei ist allerdings zu beachten, dass wir in diesem Fall keinen analytischen Ausdruck für die Funktion $\alpha(p)$ in (133), welche analog zu (128) definiert ist, haben und somit im Allgemeinen ebenfalls nicht für die Koeffizienten $Z_n(k)$. Auf die $k-$Abhängigkeit hat das jedoch keinen Einfluss, weshalb wieder problemlos das Verhalten für $k \to \pm\infty$ bestimmt werden kann. Es stellt sich hierbei ebenfalls heraus, dass im Analogon von (130) für $k < 0$ bzw. $k > 1$

$$\begin{aligned}\langle\overline{\psi}\psi\rangle(k)|_{m\to 0} = -\frac{sign(m)}{2\pi}\frac{B_{max}}{2}\Big(\sum_{n=0}^{s}(-1)^n\frac{Z_n(k)}{(B_{max}L^2)^{n+1}} \\ + (-1)^{s+1}\frac{e^{-\frac{B_{max}L^2}{3}(3k-2)\Theta_L}}{(B_{max}L^2k)^{s+1}}\int_0^1 dp\ \alpha^{(s+1)}(p)e^{B_{max}L^2pk}\Big)\end{aligned} \tag{134}$$

$$\begin{aligned}Z_n(k>1) &= e^{\frac{2}{3}B_{max}L^2}\frac{\alpha^{(n)}(0)}{k^{n+1}}\left(\frac{\alpha^{(n)}(1)}{\alpha^{(n)}(0)} - e^{-B_{max}L^2k}\right) \\ Z_n(k<0) &= -\frac{\alpha^{(n)}(1)}{k^{n+1}}\left(\frac{\alpha^{(n)}(0)}{\alpha^{(n)}(1)} - e^{B_{max}L^2k}\right)\end{aligned}$$

der erste Koeffizient $Z_0(k)$, auf beiden Seiten des Magnetfeldes verschwindet. Da $Z_1(k)$ auch hier der erste nichtverschwindende Koeffizient ist, stellt sich somit wieder ein $1/k^2$-Abfall ein, der auch in Abb. 11 zu sehen ist.
Auch in diesem Fall lässt sich entsprechend Abb. 9 der Gültigkeitsbereich für die verschiedenen Ordnungen n veranschaulichen. Wir verzichten an dieser Stelle jedoch auf eine entsprechende Darstellung.

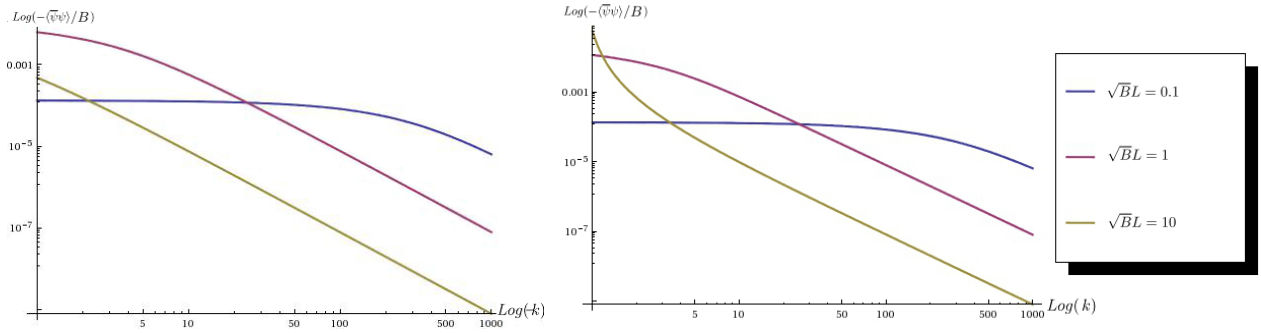

Abbildung 11: Es wurde für verschiedene $\sqrt{B}L$ mit $B := B_{max}$ der Logarithmus des chiralen Kondensats (133) über dem Logarithmus der dimensionslosen Ortskoordinate k aufgetragen für $k < 0$ (links) und $k > 1$ (rechts). In Abhängigkeit der Größe des Flusses stellt sich hier ebenfalls jeweils ein lineares Abfallen mit dem Anstieg -2 ein.

3.3 Chirales Kondensat - Numerische Berechnung

3.3.1 Weltliniendarstellung

Zur Anwendung des numerischen Formalismus ist die Weltliniendarstellung des Chiralen Kondensats notwendig. Zur Herleitung betrachten wir (7) bei $\eta = 0$ und $\overline{\eta} = 0$ mit der Wirkung $S_E = \int d^d x \overline{\psi}(\not{D} + m)\psi$:

$$E_E = ln\left[\int \mathcal{D}\overline{\psi}\mathcal{D}\psi e^{-\int d^d x\left(\overline{\psi}(\not{D}+m)\psi\right)}\right]. \tag{135}$$

Durch Ableitung nach der Masse erhalten wir

$$\frac{\partial E_E}{\partial m} = -\int d^d x \frac{\int \mathcal{D}\overline{\psi}\mathcal{D}\psi(\overline{\psi}\psi)e^{-S_E}}{\int \mathcal{D}\overline{\psi}\mathcal{D}\psi e^{-S_E}} = -\frac{\partial \Gamma_E}{\partial m} = -\int d^d x \frac{\partial \mathcal{L}_E}{\partial m}, \tag{136}$$

woraus folgt:

$$\langle\overline{\psi}\psi\rangle = \frac{\partial \mathcal{L}_E}{\partial m}. \tag{137}$$

Wir müssen also lediglich Gleichung (30) nach der Masse ableiten und erhalten dadurch

$$\langle\overline{\psi}\psi\rangle = -\frac{m}{(4\pi)^{\frac{d}{2}}}\int_0^\infty \frac{dT}{T^{\frac{d}{2}}} e^{-m^2 T}\langle W_{Sp}\rangle. \tag{138}$$

Es muss in $d = 2 + 1$ noch der Vakuumterm vom WLEW abgezogen um divergente Anteile zu entfernen. Da durch das Ableiten nach der Masse die Ordnung des Eigenzeitparameters T im Nenner verringert wird, ist die Einführung des zweiten Counterterms nicht mehr erforderlich. Das hat unter anderem den Vorteil, dass bei der numerischen Auswertung auf die in Kap. 2.5 beschriebene Fitprozedur für kleine T verzichtet werden kann.

3.3.2 Numerische Bestimmung des chiralen Kondensats

Wie wir in Kapitel 2.5 gesehen haben, werden aufgrund des exponentiellen Anstiegs des Spinfaktors numerische Ungenauigkeiten, der mit großen T schnell variiernden Phase des spinoriellen WLEW, verstärkt. Das macht eine T-Integration für kleine Massen m unmöglich, da der Dämpfungsfaktor e^{-m^2T} die Streuung der Messwerte nicht ausreichend dämpft. Im Folgenden werden wir versuchen, die numerisch berechneten Werte des spinoriellen WLEW in den zugänglichen Bereichen kleiner T für verschiedene Eichpotentiale geeignet anzufitten, um eine Extrapolation des WLEW im Bereich großer T zu erreichen. Damit soll eine Approximation des chiralen Kondensats für sämtliche Massen m ermöglicht werden, was z.B. in Hinblick auf die Untersuchung der magnetischen Katalyse in inhomogenen Magnetfeldern von Interesse sein kann (siehe Kap. 3.4). Mit Hilfe der analytischen Ergebnisse aus dem vorherigen Abschnitt können dann die Approximationsergebnisse beurteilt werden.
Ausgangspunkt der folgendenen Betrachtungen ist die Weltliniendarstellung des chiralen Kondensats (138) in $d = 2 + 1$ Dimensionen:

$$\langle\overline{\psi}\psi\rangle = -\frac{m}{8\pi^{\frac{3}{2}}}\int_{1/\Lambda^2}^{\infty} dT \frac{e^{-m^2T}}{T^{\frac{3}{2}}}\langle W_{Sp}\rangle. \tag{139}$$

In Anlehnung an die analytische Lösung (44) im konstanten B-Feld Fall verwenden wir zunächst den Ansatz

$$\langle W_{Sp}\rangle = \frac{aT}{\sinh(aT)} \cdot 4 \cdot \cosh(bT) \tag{140}$$

als Fitfunktion mit den aus den numerischen Daten zu bestimmenden Paramtern a und b, die nicht von T abhängen sollen. Dieser Ansatz soll den WLEW und den Spinaktor durch unterschiedliche Fitparameter separat behandeln. Es zeigt sich allerdings, dass er für $a \neq b$ im Widerspruch zu den Ergebnissen aus Kap 3.2 steht, welche $\langle\overline{\psi}\psi\rangle|_{m\to 0} \neq 0$ für unsere Eichpotentiale voraussagen. Um das zu demonstieren verwenden wir die Ergebnisse aus Anhang B.1. Damit ergibt sich für das renormierte chirale Kondensat:

$$\begin{aligned}\langle\overline{\psi}\psi\rangle &= -\frac{m}{2\pi^{\frac{3}{2}}}\int_0^{\infty} dT \frac{e^{-m^2T}}{\sqrt{T}}\left[a\frac{\cosh(bT)}{\sinh(aT)} - \frac{1}{T}\right] \\ &\overset{(B.12),(B.13)}{=} -\frac{1}{2\pi}\left[m\sqrt{\frac{a}{2}}\left[\zeta\left(\frac{1}{2},\frac{1}{2}\left(\frac{m^2-b}{a}+1\right)\right) + \zeta\left(\frac{1}{2},\frac{1}{2}\left(\frac{m^2+b}{a}+1\right)\right)\right] + 2m^2\right].\end{aligned} \tag{141}$$

Zur Untersuchung des Grenzfall verschwindender Massen m benutzen wir die Reihendarstellung der Hurwitz-ζ-Funktion:

$$\begin{aligned}m\cdot\zeta\left(\frac{1}{2},\frac{m^2}{2a}\mp\frac{b}{2a}+\frac{1}{2}\right) &= m\sum_{n=0}^{\infty}\frac{1}{\left(\frac{m^2}{2a}\mp\frac{b}{2a}+\frac{1}{2}+n\right)^{\frac{1}{2}}} \\ &= \frac{1}{(\frac{1}{2a}\mp\frac{b}{2am^2}+\frac{1}{2m^2})^{\frac{1}{2}}} + m\sum_{n=1}^{\infty}\frac{1}{\left(\frac{m^2}{2a}\mp\frac{b}{2a}+\frac{1}{2}+n\right)^{\frac{1}{2}}}.\end{aligned} \tag{142}$$

Es folgt also

$$m\cdot\zeta\left(\frac{1}{2},\frac{m^2}{2a}\mp\frac{b}{2a}+\frac{1}{2}\right) \overset{m\to 0}{\to} \begin{cases}0 & \frac{b}{a}\neq\pm(2k+1), \quad k=0,1,... \\ \sqrt{2a} & \frac{b}{a}=\pm(2k+1), \quad k=0,1,...\end{cases}. \tag{143}$$

Da für unsere Beispieleichpotentiale der das Verhältnis $\frac{b}{a}$ Werte nahe 1 annimmt, geht somit das chirale Kondensat für $a \neq b$ zwangsweise gegen 0. Für $a = b$ folgt somit für unseren Ansatz

$$\langle\overline{\psi}\psi\rangle|_{m\to 0} = -\frac{a}{2\pi}. \tag{144}$$

Das chirale Kondensat für $m \to 0$ bestimmt sich folglich aus der Asymptotik des WLEW[7]. Im Fall eines konstanten Magnetfeldes kann das chirale Kondensat bekanntlich exakt berechnet werden [35]. In diesem ergibt sich (144) mit $a = eB$. Wir werden also im Folgenden den Fitansatz (140) mit $a = b$ verwenden, sind uns aber im Klaren darüber, dass (140) nicht den realen Verlauf des chiralen Kondensates wiedergeben muss. So könnte z.B. eine hypothetisches reales $a = a_R$ eine Funktion von T sein oder der Ansatz (140) mit $a = b$ durch eine weitere Funktion überlagert sein, welche die Asymptotik des chiralen Kondensats nicht signifikant verändert.
Aus dem gewonnenen Fitparameter lässt sich dann direkt aus (144) das Kondensat im chiralen Limes ablesen, da wie bereits erwähnt im masselosen Fall nach unserem Ansatz nur die Asymptotik des WLEW für $T \to \infty$, wegen $\langle W_{Sp}\rangle \propto 4aT$ für $T \gg 1$, eine Rolle spielt. Für eine approximative Berechnung des Kondensats im massebehafteten Fall kann dann auf

$$\langle\overline{\psi}\psi\rangle = -\frac{a_{Fit}}{2\pi} + \frac{m}{2\pi^{\frac{3}{2}}}\int_0^{T_{Fit}} dT \frac{e^{-m^2T}}{T^{\frac{3}{2}}}\left(a_{Fit}T\cdot\coth(a_{Fit}T) - \frac{1}{4}\langle W_{Sp}\rangle\right) \tag{145}$$

zurückgegriffen werden, wobei ab $T = T_{Fit}$ die extrapolierten Werte des WLEW verwendet werden. T_{Fit} entspricht somit der im folgenden Abschnitt definierten unteren Grenze T_{min} des jeweiligen Fitbereichs.

Sinusförmiges B-Feld

Es muss noch festgelegt werden, nach welchen Kriterien der Fitbereich $[T_{min}, T_{max}]$ bestimmt wird. Die obere Grenze des Fitbereichs sollte so bestimmt werden, dass systematische Fehler an der betreffenden Stelle einerseits möglichst klein sind und andererseits sollte der Fitbereich möglichst groß sein, sodass die Asymptotik des WLEW gut extrapoliert werden kann. Wir wählen im Folgenden als Kriterium zur Auswahl von T_{max}:

$$0.25\cdot\langle W_{Sp}\rangle|_{T=T_{max}} \approx \Delta\langle W_{Sp}\rangle|_{T=T_{max}}. \tag{146}$$

Bei T_{max} soll der Fehler $\Delta\langle W_{Sp}\rangle$ demnach rund 25% des WLEW an selbiger Stelle betragen. Die obere Fitgrenze wird folglich dynamisch in Abhängigkeit von gegebenen Loopkonfigurationen und Beschaffenheit des jeweiligen Eichpotentials bestimmt. Als untere Grenze legen wir für das sinusförmige B-Feld $T = 1.5$ fest, wodurch zum einen ein ausreichend großer Fitbereich gewährleistet wird und zum anderen wegen $T > 1$ die im Folgenden beschriebene Fitprozedur konsistent bleibt.
Um einen Fitparameter a zu bestimmen der die Asympotik des WLEW möglichst exakt wiedergibt, erweist es sich als sinnvoll den Fitbereich $[T_{min}, T_{max}]$ in gleichgroße Intervalle zu unterteilen, in welchen wir den numerischen bestimmten WLEW jeweils linear fitten und somit dessen Ableitung numerisch bestimmen. Wir lassen an dieser Stelle eine T-Abhängigkeit des Fitparameter a, die sich für $T > 1$ nur schwach äußern soll und für $T \to \infty$ verschwindet. Das Ergebnis (144) wird sich entsprechend nicht signifikant ändern. Betrachten wir nun die Ableitung des WLEW gemäß des Ansatzes $\langle W_{Sp}\rangle = a(T)T\cdot\coth(a(T)T)$ mit $a(T) \overset{T\to\infty}{\to} a_G$ so ergibt sich

$$\begin{aligned}\frac{d\langle W_{Sp}\rangle}{dT} &= \left(a(T) + \frac{da(T)}{dT}T\right)\cdot\coth(a(T)T) - a(T)T\cdot\left(a(T) + \frac{da(T)}{dT}T\right)\cdot\frac{1}{\sinh^2(a(T)T)} \\ &\overset{T\gtrsim 1}{\approx} \left(a(T) + \frac{da(T)}{dT}T\right) - 4\cdot a(T)T\cdot\left(a(T) + \frac{da(T)}{dT}T\right)\cdot e^{-2a(T)T}.\end{aligned} \tag{147}$$

[7] Ein Ansatz $\langle W_{Sp}\rangle = aT + b$ in (140) führt auf $\langle\overline{\psi}\psi\rangle = -\frac{a}{8\pi} + \frac{m^2}{4\pi}(b-1)$, was diese Aussage bekräftigt.

Da für $T > 1$ angenommen wird, dass $a(T)$ nahezu konstant ist, muss $\frac{da(T)}{dT}$ folglich enstprechend klein sein. Somit erscheint der Ansatz

$$\frac{d\langle W_{Sp}\rangle}{dT} = P_1 - P_2 \cdot T \cdot e^{-P_3 \cdot T} \overset{T\to\infty}{\to} P_1 = a_G \tag{148}$$

als Fitfunktion für die numerisch bestimmte Ableitung sinnvoll. Aus den daraus bestimmten Parametern P_1, P_2 und P_3 lässt sich dann anhand von (147) rückwirkend auf Konsistenz der getroffenen Annahmen schließen.
Zur Demonstration der Prozedur verwenden wir im folgenden Loopsensembles mit $n_L = 300000$ Loops, welche jeweils $N = 1000$ Stützstellen besitzen. Die linearen Fits an die Daten des WLEW werden in Intervallen der Größe $\Delta T = 0.2$ an vollzogen. Das Ergebnis gemäß Gleichung (148) ist beispielhaft in Abb. 12 für $\lambda_B = 5$, $\overline{B} = 1$ und $B_1 = 0.5\overline{B}$ an drei verschiedenen Stellen im Magnetfeld aufgetragen. In Tabelle 1 sind zudem die Werte der Fitparameter P_1, P_2 und P_3 angegeben.

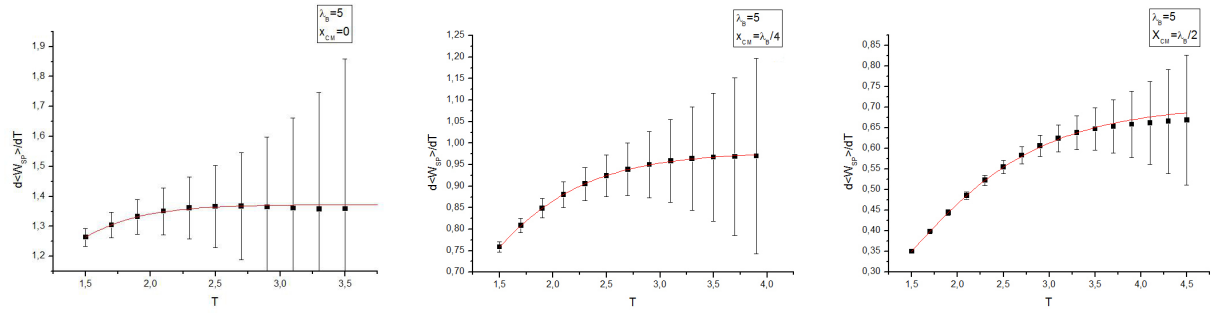

Abbildung 12: Es wurden für $\lambda_B = 5$ an verschiedenen Stellen im Magnetfeld der gesuchte asymptotische Anstieg $P_1 = a_G$ des WLEW bestimmt. Es zeigt sich hierbei eine sehr gute Übereinstimmung mit den analytisch bestimmten Werten $a = 1.36711$ ($x_{\mathrm{CM}} = 0$), 0.97617 ($x_{\mathrm{CM}} = \lambda_B/4$) und 0.68036 ($x_{\mathrm{CM}} = \lambda_B/2$).

Tabelle 2: Fitparameter

	$x_{\mathrm{CM}} = 0$	$x_{\mathrm{CM}} = \lambda_B/4$	$x_{\mathrm{CM}} = \lambda_B/2$
P_1	1.37285 ± 0.10116	0.97876 ± 0.06154	0.70348 ± 0.03258
P_2	7.36144 ± 48.93383	2.57221 ± 2.0614	1.84129 ± 0.18678
P_3	3.0777 ± 4.96165	1.90955 ± 0.68815	1.3705 ± 0.11882

Die Fehler der Fitwerte P_1 in Tabelle 2 scheinen überwertet, können allerdings problemlos durch höhere Loopszahlen bzw. durch eine feinere Unterteilung des Fitbereichs $[T_{min}, T_{max}]$ minimiert werden. Die gemäß (147) erwarteten Verhältnisse für die Parameter P_1, P_2 und P_3 können ebenfalls nahezu reproduziert werden.
Ein ähnlicher Verlauf wie in Abb. 12 zeigt sich auch für die anderen Wellenlängen für welche das Verfahren getestet wurde. Auch bei diesen konvergiert die Ableitung des WLEW gegen einen Grenzwert. Die für die verschiedenen Wellenlängen λ_B gemäß (144) bestimmten Werte für das chirale Kondensat sind in Abb. 13 mit den analytischen Werten aus Kap. 3.2 über der Wellenlänge λ_B aufgetragen. Es zeigt sich hierbei, dass aus der Asymptotik des WLEW, das chirale Kondensat im Limes verschwindender Masse reproduziert werden kann.

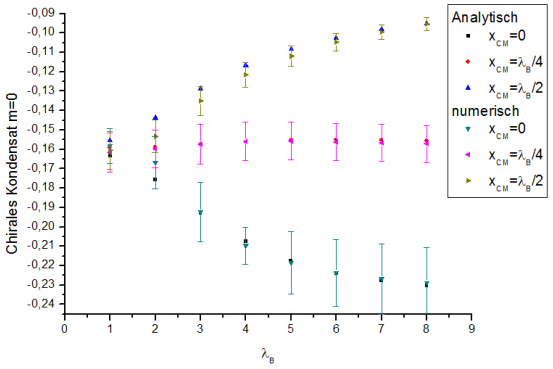

Abbildung 13: Die aus (116) bestimmten analytischen Werte für das chirale Kondensat und die aus der Asymptotik des WLEW bestimmten Werte über der Wellenlängen an verschiedenen Stellen im Magnetfeld aufgetragen. Das B-Feld wird dabei wiederum durch die Parameter $\overline{B} = 1$ und $B_1 = 0.5\overline{B}$ charakterisiert. Die Werte stimmen dabei jeweils unter Beachtung der Fehlerintervalle überein.

Lokalisiertes, linear anwachsendes B-Feld

Das gleiche Verfahren kann auch auf das zweite Beispiel-Eichpotential angewendet werden. Hierbei verwenden wir zur Demonstration $n_L = 100000$ Loops pro Ensemble mit jeweils $N = 1000$ Stützstellen. Die maximale Feldstärke soll $B_{max} = 1$ betragen. Als Kriterum für die obere Fitgrenze wählen wir wieder das Kriterium (146). Es erweist sich als sinnvoll für dieses Magnetfeld die untere Fitgrenze zwischen $T = 2$ und $T = 5$ so zu wählen, dass eine geeignete Kombination aus möglichst großem Fitbereich und möglichst kleinem reduzierten χ^2 vorliegt. Der Fitbereich wird in Teilintervalle der Größe $\Delta T = 0.2$ gegliedert. Aus der numerischen Ableitung des WLEW wird dann wiederum gemäß (148) der Parameter P_1 bestimmt. Die Ergebnisse der numerischen Ableitung des WLEW sind in Abb. 14 bzw. Tabelle 3 sowie das numerische und analytisch bestimmte chirale Kondensat in Abb. 15 dargestellt.

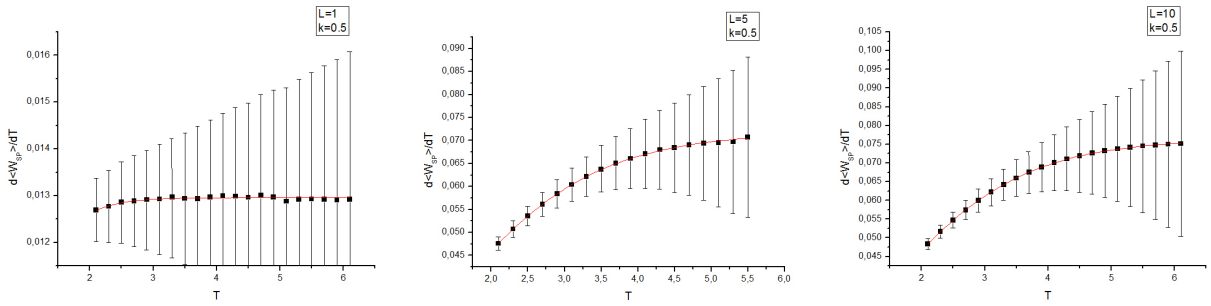

Abbildung 14: Für $L = 1$, $L = 5$ und $L = 10$ wurde bei $k = 0.5$ die numerische Ableitung des WLEW mittels (148) angefittet.

Es zeigt sich auch hier eine gute Übereinstimmung des numerisch bestimmten chiralen Kondensats mit den analytischen Werten. Lediglich für kleine Längen L zeigen sich Abweichungen (siehe Abb. 15). Diese lassen sich dadurch erklären, dass der Fitbereich in diesem Fall möglicherweise nicht

Tabelle 3: Fitparameter

$k = 0.5$	$L = 1$	$L = 5$	$L = 10$
P_1	0.01296 ± 0.00057	0.07181 ± 0.00636	0.07649 ± 0.00654
P_2	0.0338 ± 1.20641	0.12711 ± 0.0706	0.12575 ± 0.05264
P_3	2.6538 ± 17.347743	1.14295 ± 0.36175	1.06706 ± 0.28424

ausreichend groß ist um die Asymptotik des WLEW zu erfassen, bzw. unser Ansatz (140) für kleine L unzureichend ist.

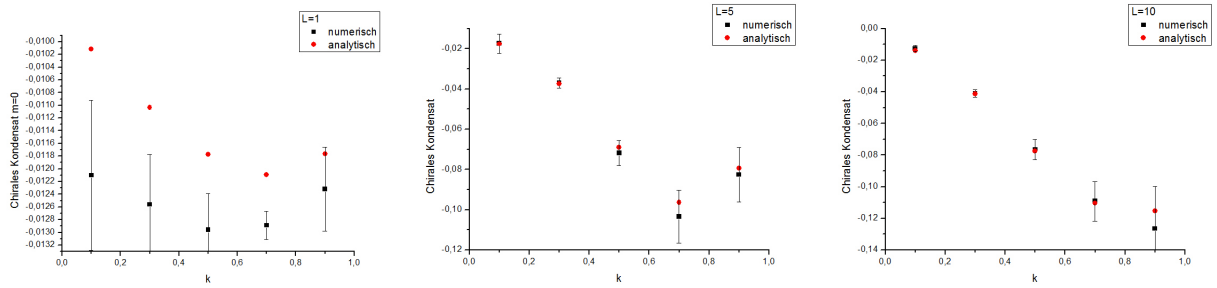

Abbildung 15: Es sind die aus (133) bestimmten analytischen sowie numerisch extrapolierte Werte für das chirale Kondensat über k aufgetragen. Lediglich für kleine L ergeben sich quantitative Abweichungen von den analytischen Werten.

Es lässt sich somit zusammenfassend sagen, dass das angewendete Näherungsverfahren für die Beispielmagnetfelder zufriedenstellende Ergebnisse liefert. Im Allgemeinen wird die Anwendbarkeit jedoch vom jeweiligen Eichpotential abhängen. Sollte die Asymptotik des WLEW mittels Weltlinienumerik nicht zugänglich sein, so wird auch das Verfahren keine brauchbaren Ergebnisse liefern. Für Magnetfelder auf die unsere Methode angewandt werden kann, zeigt sich neben der Approximierbarkeit des Kondensats für endlichen Massen mittels (145) ein weiterer Vorteil. Da der WLEW für uniaxiale Magnetfelder dimensionsabhängig ist und wie gezeigt in $d = 2 + 1$ durch analytische Berechnung des chiralen Kondensats die Qualität der Extrapolation überprüfbar ist, kann der für unsere Eichpotentiale genäherte WLEW auch für Berechnungen in Dimensionen $d \neq 2 + 1$ verwendet werden. Auch ist eine Verwendung des WLEW für andere physikalische Größen, welche ähnlich wie das chirale Kondensat (138) mit dem WLEW verknüpft sind, denkbar. Eine mögliche Anwendung wird im Folgenden besprochen.

3.3.3 Anwendungsbeispiel: Magnetische Katalyse in inhomogenen Feldern im NJL Model

Eine Anwendung der Ergebnisse stellt die Diskussionsmöglichkeit der in Kap. 3.1 erwähnten magnetischen Katalyse in inhomogenen Feldern dar. Der Effekt wurde in [35, 36] am Beispiel des Nambu-Jona-Lasinio (NJL) Models in einem konstanten Magnetfeld durch Analyse des effektiven Potentials studiert. Aufgrund der Nähe der Weltliniennumerik zu Schwingers Weltlinienformalismus lassen sich diese Ergebnisse auf inhomogene Felder verallgmeinern. Das wollen wir an dieser

Stelle mit Hilfe der Erkenntnisse aus den vorherigen Abschnitten zumindest *qualitativ* demonstrieren, eine quantitative Diskussion ist jedoch ebenfalls möglich.
Gegeben sei also die Lagrangedichte des NJL Models in $d = 2 + 1$ in der Form:

$$\mathcal{L} = \frac{1}{2}\left[\overline{\Psi}, i\gamma^\mu D_\mu \Psi\right] - \overline{\Psi}\left(\sigma + \gamma^3\tau + i\gamma^5\pi\right)\Psi - \frac{1}{2G}\left(\sigma^2 + \pi^2 + \tau^2\right), \tag{149}$$

wobei sich die Euler-Lagrange-Gleichungen der Hilfsfelder zu

$$\sigma = -G\overline{\Psi}\Psi, \quad \tau = -G\overline{\Psi}\gamma^3\Psi, \quad \pi = -G\overline{\Psi}i\gamma^5\Psi \tag{150}$$

ergeben. Die Spinorfelder sowie die kovariante Ableitung tragen hierbei einen zusätzlichen Farbindex $\alpha = 1, ..., N$. Die effektive Wirkung der Hilfsfelder lautet:

$$\begin{aligned} \Gamma(\sigma, \tau, \pi) &= -\frac{1}{2G}\int d^3x \left(\sigma^2 + \pi^2 + \tau^2\right) + \tilde{\Gamma}(\sigma, \tau, \pi) \\ \exp(i\tilde{\Gamma}) &= \int \mathcal{D}\Psi\mathcal{D}\overline{\Psi} e^{\frac{i}{2}\int d^3x\left[\overline{\Psi}, \left\{i\not{\partial} - (\sigma + \gamma^3\tau + i\gamma^5\pi)\right\}\Psi\right]} \end{aligned} \tag{151}$$

Für $N \to \infty$ kann $\tilde{\Gamma}(\sigma, \tau, \pi)$ analog zu den Rechnungen in Kap 2.1 bis 2.3 berechnet werden. Als verallgemeinertes, euklidisches Analogon von Gleichung (55) aus [35] ergibt sich dann für $\tau = \pi = 0$

$$\tilde{\Gamma}_E(\sigma) = -\frac{1}{2}Tr\ln(\not{D}^2 + \sigma^2) = \frac{N}{16\pi^{3/2}}\int dx \int_{\frac{1}{\Lambda^2}}^{\infty} \frac{dT}{T^{\frac{5}{2}}} e^{-\sigma^2 T}\langle W_{Sp}\rangle, \tag{152}$$

welches die selbe Form wie Gleichung (35) aus Kap. 2.4 hat und das effektive Potential

$$V(\rho) = \frac{\rho^2}{2G} + \frac{N}{16\pi^{3/2}}\int_{\frac{1}{\Lambda^2}}^{\infty} \frac{dT}{T^{\frac{5}{2}}} e^{-\rho^2 T}\langle W_{Sp}\rangle. \tag{153}$$

Dieses kann nun in Abhängigkeit von der dimensionslosen Kopplungskonstanten $g := N\Lambda G/\pi$ und der Feldstärke B auf Minima untersucht werden. Nichttriviale Lösungen σ bzw. ρ entsprechen dabei gemäß (149) und (150) einer dynamischen Masse m_{dyn}, die sich aus dem chiralen Kondensat bestimmt. Die Auswertung von Gleichung (153) kann mittels der Methoden aus den vorherigen Abschnitten 3.2/3.3 für unsere inhomogenen Beispielmagnetfelder vollzogen werden. Wir verzichten hier auf eine quantitive Diskussion. Eine qualitative Betrachtung ist jedoch ohne großen Aufwand möglich. Da wir wissen, dass sich das chirale Kondensat für $m \to 0$ aus der Asymptotik des WLEW bestimmt, können wir an jedem Punkt x im Magnetfeld den WLEW gemäß (144) durch ein effektives Magnetfeld $a(x) =: B_{eff}(x)$ grob approximieren

$$\langle W_{Sp}\rangle(x) \approx B_{eff}(x) \cdot T \cdot \coth(B_{eff}(x)T). \tag{154}$$

Für genaue *quantitative* Betrachtungen sollte stattdessen Gleichung (145) verwendet werden. Dadurch verallgemeinern sich die Ergebnisse aus [35] als Funktion vom Ort im Magnetfeld, was unter anderem auf eine ortsabhängige dynamischen Masse $m_{dyn}(x)$ schließen lässt. Damit zeigt sich unmittelbar, dass selbst an Punkten an denen kein Magnetfeld vorhanden ist, wie bei einem lokalisierten B-Feld, masselose Fermionen selbst unter minimaler Wechselwirkung eine Masse erhalten, da die Gap-Gleichung $dV/d\rho = 0$ keine triviale Lösung $\rho = 0$ besitzt [35].
In [28] wurde die Schwinger-Dyson-Gleichung eines Quasipartikelpropagators mit dynamischer Masse in Anwesenheit eines endlichen Ladungsträgerdichte n und einer endlichem Temperatur T bei einem nichtverschwindenden konstanten Magnetfeld untersucht. Dabei kam man zu dem Schluss,

dass die daraus folgende Gap-Gleichung nur nichttriviale Lösungen oberhalb einer kritischen Feldstärke $B_C(n,T)$ aufweist und eine magnetische Katalyse entsprechend nur oberhalb dieser stattfinden kann. Es stellt sich hierbei die Frage, ob ähnliches für $B_{eff}(x)$ gefolgert werden kann. Eine Verallgemeinerung der Betrachtungen aus [28] auf inhomogenen Felder wäre dahingehend interessant.

3.4 Chirales Kondensat in Graphen

Wir wollen uns an dieser Stelle mit der Frage beschäftigen, ob das chirale Kondensat bzw. die Ergebnisse aus Kapitel 3.2/3.3 in Graphen beobachtet werden können. Das 2004 erstmals hergestellte Graphen [47] stellt die erste zweidimensionale Realisierung eines Karbonkristalls dar und ermöglichte die Beobachtung zahlreicher interessanter mechanischer und elektronischer Eigenschaften wie z.B. dem anomalen Quanten-Hall-Effekt (QHE) [46]. Besonders interessant aus quantenfeldtheoretischer Sicht ist dabei die Tatsache, dass Niederenergieanregungen in Graphen in Übereinstimmung mit dem Experiment [46] durch masselose Dirac-Fermionen beschrieben werden können, was schon vor der Herstellung Graphens theoretisch vorausgesagt wurde [54]. Ausführliche Informationen zur Gitterstruktur und den damit einhergehenden elektronischen Eigenschaften Graphens sind in zahlreichen Reviews zu finden (siehe z.B. [38, 6]). Die für uns wichtigsten Grundlagen zur QED_{2+1} in Graphen wurden im Anhang E zusammengefasst.
Die Beschreibung der Niederenergieanregungen durch eine paritätsinvariante QED_{2+1} - Lagrangedichte mit zwei Fermionen und (Pseudo-)Spinfreiheitsgraden [38] resultiert aus der hexagonalen Gitterstruktur des Graphens mit zwei dreieckigen Untergittern A und B sowie aus den zwei inequivalenten Eckpunkten der hexagonalen Brillouinzone - den Dirac-Punkten K_+ und K_-. Da solch eine Formulierung der QED in Kap. 3.1 vorgestellt und in den vorhergehenden Abschnitten verwendet wurde, stellt sich die Frage, ob die Ergebnisse aus den entsprechenden Kapiteln in Graphen experimentell beobachtbar sind. In der Tat wird in aktuellen Veröffentlichungen das chiralen Kondensat und die damit verbundene Bildung einer Bandlücke unter Wechselwirkung im Zusammenhang mit dem QHE als Ursache für das Vorhandensein verschiedener Quanten-Hall-Plateaus diskutiert [34, 27, 29, 30]. Die Zusammenhänge wollen wir im Folgenden kurz schildern, um eine Einordnung unserer Ergebnisse in die aktuelle experimentelle Situation zu verdeutlichen.
Bereits vor dem experimentellen Nachweis [46] wurde theoretisch der anomale Quanten-Hall-Effekt in Anwesenheit eines Magnetfeldes senkrecht zu einer Graphen-Monolage vorhergesagt [62, 37]:

$$\sigma_{xy} = \nu\frac{e^2}{h} = \pm 4(n+1/2)\frac{e^2}{h}, \quad n = 0,\ 1,\ 2,\ ..., \tag{155}$$

wobei ν die Füllfaktoren bezeichnet und n die Landau-Niveaus(LN) durchnummeriert. Die Struktur der Füllfaktoren ist dabei das Resultat *relativistischer* Landau-Level-Quantisierung. Unterschiede im Vergleich zum nichtrelativistischen QHE sind zum einen der Faktor 4, welcher durch den vierfachen Entartungsgrad der Energieniveaus aufgrund des Spins und der beiden inequivalenten Dirac-Punkte zu erkären ist. Zum anderen ist es der Füllfaktor $\nu = \pm 2$, der daraus resultiert, dass im undotierten Zustand[8] das Energieniveau $E = 0$ zur Hälfte von Ladungsträgern aus dem Leitungsband als auch von Löchern aus dem Valenzband besetzt ist. Die spezielle Struktur (155) ist zunächst in Magnetfeldern bis $\lesssim 10T$ beobachtet worden [46], später in „suspended" Graphen sogar bei $< 1T$ [12, 5].

[8] Eine Dotierung kann z.B. durch Modulation der Ladungsträgerdichte mittels Anlegen einer Gate-Spannung erreicht werden.

Durch Messungen in stärkeren Magnetfeldern zwischen $20T$ und $45T$ zeigte sich eine weitere Reihe von Füllfaktoren $\nu = 0, \pm 1, \pm 4$ [61], welche der Aufhebung der kompletten vierfach-Entartung im $n = 0$ ($\nu = 0, \pm 1$) bzw. der Spinentartung in $n = 1$ LN ($\nu = \pm 4$) zugeschrieben werden und die später wieder in deutlich schwächeren Magnetfeldern in suspended Graphen nachgewiesen werden konnten [12, 5]. Als deren Ursache wurden zunächst verschiedene Mechanismen diskutiert. Zum einen basierend auf der Elektron-Phonon-Wechselwirkung [17, 45] und zum anderen auf der Coulomb-Wechselwirkung. Bei letztgenannter Wechselwirkung werden vor allem die oben erwähnte magnetische Katalyse (MK) als auch der Quanten-Hall-Ferromagnetismus (QHF) [45, 59] zur Erklärung der zusätzlichen Quanten-Hall-Plateaus herangezogen. Der QHF basiert auf der Minimierung der Coulomb-Wechselwirkung in einem bestimmten LN durch eine maximale Antisymmetrisierung der Ortswellenfunktion der Elektronen [45, 59]. Signifikantestes Erkennungsmerkmal des QHF ist die Tatsache, dass dieser im Gegensatz zur MK bzw. der Elektron-Phonon-Kopplung nicht nur den Entartungsgrad des $n = 0$ LN reduziert sondern in sämtlichen LN wirkt. Da zum einen die Coulomb-Wechselwirkung die führende Energieskala setzt [26] und zum anderen zusätzliche Füllfaktoren $\nu = \pm 3$ sowie der fraktionale QHE [12, 5] beobachet wurden, gelten der QHF und die MK momentan als führende Szenarien zur Erklärung der neuen Plateaus. Eine wichtige theoretische Beobachtung ist dabei die notwendige Koexistenz der Ordnungsparameter des QHF und der MK [27, 29, 55]. Eine simultane Annahme der beiden Szenarien führt dann dazu, dass sämtliche experimentell beobachteten Quanten-Hall-Plateaus qualitativ erklärt werden können[29, 30].
Die theoretischen Ergebnisse lassen Raum für *Spekulationen* über die Beobachtbarkeit des chiralen Kondensats in Graphen. Allerdings sind auch einige theoretische Problematiken zu klären. Unter anderem stellt sich die Frage, welche konkreten Beiträge die MK und der QHF zur Bildung der Quanten-Hall-Plateaus liefern um eine experimentelle Unterscheidung zu ermöglichen. Ein weiterer Punkt ist, dass sich bisherige theoretische Betrachtungen nicht auf inhomogene Magnetfelder beziehen. So ist die Frage zu klären, ob und wie sich der QHE in inhomogenen Feldern manifestiert, wenn Teile des Magnetfelds unterkritische Stärken $B(x) < B_C$ erreichen [28], was auch für die unten folgenden Diskussion des Quantendiffusionseffekt eine Rolle spielt. Eine quantitative Messung des chiralen Kondensats erscheint aus den genannten Gründen nur schwer möglich, zumal im Zusammenhang mit der magnetischen Katalyse, neben dem chiralen, weitere Kondensate diskutiert werden, die zu einer dynamischen Masse führen können [29, 30].
Deutlich interessanter erscheint die Frage nach der Beobachtbarkeit des in Kap. 3.2.4 untersuchten Quantendiffusionseffektes. So ist z.B. theoretisch eine Versuchsanordnung denkbar in der sich eine unverformte Graphenprobe direkt an eine wie in Abb. 3 verformte, oder an eine von einem (semi-)lokalisierten Magnetfeld durchdrungene Graphenprobe anschließt. Die Betrachtungen aus Kap. 3.2.4 lassen den Schluss zu, dass sich das chirale Kondensat aus dem Element mit (Pseudo-) Magnetfeld in das Element ohne Feld erstreckt und dort, je nach Wechselwirkungsstärke der Fermionen, eine magnetische Katalyse der masselosen Ladungsträger hervorrufen könnte. Eine mögliche Konsequenz wäre dann die Beobachtung einer Bandlücke ohne lokal vorhandenes Magnetfeld.
Vor allem die relativ niedrigen notwendigen Magnetfeldstärken zur Beobachtung des QHE in *suspended* Graphen lassen darauf schließen, dass der Quantendiffusionseffektes mittels Pseudomagnetfeldern beobachtbar sein könnte. Das liegt zum einen daran, dass Pseudomagnetfelder im Vergleich zu realen Magnetfeldern wirklich nur innerhalb des deformierten Graphens lokalisiert sind und zum anderen mit möglichen $\approx 10T$ [6, 33, 32] große Stärken aufweisen. Um das quantitativ zu untermauern betrachten wir Abb. 7 und 10. Dort ist erkennbar, dass das chirale Kondensat bei $k = 1 + \epsilon$ oder $k = 0 - \epsilon$ mit $\epsilon \ll 1$ je nach Länge zwischen $\approx 20\%$ ($L = 1$) und $\approx 30\%$ ($L = 10$) seines Maximalwertes im Bereich $0 < k < 1$ aufweist. Dies würde bei einer maximalen Pseudomagnetfeldstärke von $10T$ einer im Sinne von Kap. 3.3.3 definierten *effektiven* Magnetfeldstärke von rund $2T$ bis $3T$ bei $k = 1+\epsilon$ oder $k = 0-\epsilon$ entsprechen, die je nach Länge L (vgl. Abb. 7 und 10) in Probennähe un-

terschiedlich schnell abfällt. Unter Beachtung der Tatsache, dass die zur Beobachtung, der mit der magnetischen Katalyse in Verbindung gebrachten Quanten-Hall-Plateaus, notwendigen Feldstärken in suspended Graphen $\approx 2T$ bis $\approx 10T$ betragen [12, 5], könnten diese abgeschätzten effektiven Feldstärken ausreichen um eine dynamische Bandlücke in der undeformierten Graphenprobe aus unserer oben erwähnten Versuchsanordnung hervorzurufen. Allerdings möchten wir noch einmal darauf hinweisen, dass in diesem Zusammenhang, die Verallgmeinerungen der Betrachtungen aus [28] interessant wären. Wichtig sind in diesem Zusammenhang auch die Ergebnisse aus Kap. 3.2.2, welche je nach Richtung des Verschiebungsfeldes eine Verdopplung des chiralen Kondensats und damit des effektiven B-Felds, oder ein verschwindendes Kondensat vorhersagen. Dies könnte experimentell ebenfalls überprüft werden. Für im Experiment mögliche Probenabmessungen sollten die Rechnungen aus 3.2.4 mit Einheiten durchgeführt werden.
Da ein lokalisiertes B-Feld mit Hilfe von Dauermagneten im Allgemeinen nicht realisierbar ist, wäre auch eine ortsabhängige Messung der Bandlücke in einem exponentiell abfallenden Magnetfeld interessant, da Beiträge der magnetischen Katalyse aufgrund des in Kap. 3.2.4 beobachteten $1/k^2$-Abfalls des chiralen Kondesats gesondert gekennzeichnet sind. Allerdings erscheint in momentanen experimentellen Realisierungen, wie sie z.B. in [61] benutzt wurden, die Variation der Magnetfelder auf der Probenausdehnung zu gering um entsprechende Effekte beobachten zu können.

4 Zusammenfassung und Ausblick

In der vorliegenden Masterarbeit wurden mittels weltliniennumerischer Methoden fermionische Fluktuationen in inhomogenen Magnetfeldern untersucht. Dazu haben wir in Kapitel 2 zunächst die Weltliniendarstellung der effektiven Wirkung der spinoriellen Quantenelektrodynamik auf Ein-Loop-Niveau eingeführt. Die auf dieser Darstellung basierende Weltlinennumerik wurde dann an zwei konkreten Beispielen demonstriert. Dabei stellten wir verschiedene Probleme bei der Berechnung der effektiven Lagrangedichte für Fermionen heraus. Eine bedeutende Problematik stellen hierbei die starken Schwankungen des spinoriellen WLEW für große Werte des Eigenzeitparameters T aufgrund numerischer Limitierungen dar. Deren Ursache begründet sich in den Nullmoden des Dirac-Operators, welche zu einem linearen Anstieg des WLEW führen. Die Berechnung der effektiven Lagrangedichte unterhalb einer von der Magnetfeldstärke abhängigen kritischen Masse ist aus diesem Grund nicht mehr uneingeschränkt möglich. In 2.7 haben wir dann einen Versuch unternommen, diese Problematik für spezielle Eichpotentiale durch Aufspaltung des WLEW in ein Produkt aus dem analytisch bekannten WLEW für das konstante Magnetfeld und einem Erwartungswert für einen varrierenden Anteil des Eichpotentials zu lösen. Für dessen Berechnung war dabei aufgrund eines veränderten Gewichtungsfaktors ein neuer Algorithmus zur Erzeugung eines geeigneten Loopensembles mit komplexen Loops erforderlich. Der Ansatz wurde anhand eines sinusodialen variierenden B-Feldes getestet, führte jedoch schon bei der Berechnung des skalaren WLEW auf unbefriedigende Ergebnisse. Deshalb wurde auf einen ähnlichen Ansatz hingewiesen, der ebenfalls auf der Aufspaltung des WLEW basiert, jedoch bei der Berechnung des WLEW auf die Hybrid-Monte-Carlo-Methode zurückgreift und dadurch auf komplexe Loops verzichtet. Ein Test der Wirksamkeit dieses Ansatzes wäre daher für zukünftige Forschung interessant.
In Kapitel 3 wurde dann das chirale Kondensat mit Hilfe weltliniennumerischer und analytischer Methoden untersucht. Dazu haben wir zunächst eine 2+1 dimensionale paritätsinvariante Formulierung der QED erläutert. Basierend auf dieser wurde dann eine Methode zur Berechnung des chiralen Kondensats in inhomogenen Feldern durch Bestimmung der Nullmoden des Dirac-Operators aus einer Schwellengleichung vorgestellt. Mit Hilfe dieser konnten wir dann das chirale Kondensat für die inhomogenen Beispielmagnetfelder aus Kapitel 2 berechnen. Es wurde dabei beobachtet, dass beim sinusförmig variierenden B-Feld kleine Wellenlängen zu einer Variation des chiralen Kondensats um das mittlere B-Feld führen. Große Wellenlängen bzw. magnetischer Fluss hingegen haben die Proportionalität des Kondensats zum lokalen B-Feld zur Folge, wodurch auch für dieses Magnetfeld die Aussage bestätigt werden konnte, dass großer Fluss eben jene Proportionalität ergibt. Dies konnte ebenfalls im Fall des lokalisierten, konstanten B-Feldes nachgewiesen werden. Für jenes wurde ebenfalls das Abfallverhalten des chiralen Kondensats außerhalb des Magnetfeldes untersucht. Hier zeigt sich die Besonderheit, dass im Gegensatz zur effektiven Lagrangedichte der skalaren QED_{2+1} kein exponentieller, sondern ein $1/k^2$-Abfall mit der dimensionslosen Ortskoordinate k festgestellt werden kann.
Des Weiteren wurde ein Extrapolationsverfahren für den spinoriellen WLEW, basierend auf der weltliniennumerischen Bestimmung der Ableitung des WLEW und der Anwendung einer geeigneten Fitfunktion, getestet. Damit konnten das chirale Kondensat weltliniennumerisch extrapoliert und für die Beispielpotentiale mit den analytischen Ergebnissen verglichen werden. Aufgrund der Übereinstimmung der Ergebnisse konnte das Verfahren in diesen Fällen gerechtfertigt und damit eine approximative Berechnung der effektiven Lagrangedichte für kleine Massen ermöglicht werden. Es wurde dabei beobachtet, dass lediglich die Asymptotik des WLEW für die Berechnung des chiralen Kondensats eine Rolle spielt. Der Erfolg des Verfahrens wird im Allgemeinen von der Beschaffenheit des jeweils untersuchten Eichpotentials abhängen, da die Asymptotik des WLEW in T-Bereichen in denen dieser numerisch berechnet werden kann zugänglich sein muss. Für zu

ungleichmäßig varrierende Magnetfelder erscheint das Vorgehen daher nicht erfolgsversprechend.
In Kapitel 3.3.3 haben wir als Anwendungsbeispiel die Betrachtungen aus [35, 36] zur magnetischen Katalyse im Nambu-Jona-Lasinio Model anhand der Ergebnisse aus den vorherigen Abschnitten qualitativ für inhomogene Felder diskutiert. Dadurch sind wir zum Schluss gekommen, dass sich die Relationen aus [35, 36] lokal im inhomogenen Magnetfeld verallgemeinern lassen. Dadurch zeigt sich, z.B. im Fall eines lokalisierten Magnetfeldes, dass masselose Fermionen selbst im lokal feldfreien Raum unter Wechselwirkung eine dynamische Masse erhalten können. Interessant wäre in diesen Zusammenhang auch die Verallgemeinerung der Betrachtungen aus [28] zur Bildung einer Bandlücke in planaren Systemen bei *endlichen* Temperaturen und Ladungsträgerdichten auf inhomogenen Felder.
Die in 3.4 diskutierte quantitative Beobachtung des chiralen Kondensats ist nach momentanem experimentellen Stand nicht möglich. Jedoch erscheinen aber vor allem die in Graphen durch mechanische Spannung erzeugbaren Pseudo-Magnetfelder im Hinblick auf eine Beobachtung des in Kap 3.2.4 untersuchten Quantendiffusionseffektes interessant. Das liegt zum einen daran, dass diese lokalisiert sind, zum anderen scheint die Erzeugung von Feldern möglich, welche so stark sind, dass ein außerhalb des Magnetfeldes gebildetes chirales Kondensat zu einer magnetischen Katalyse bzw. einer beobachtbaren Bandlücke in einer undeformierten Graphenprobe führen könnte. Interessant sind in diesem Zusammenhang auch die Ergebnisse aus Kap. 3.2.2, die je nach Richtung des Verschiebungsfeldes, welches die Deformation der Graphenprobe beschreibt, eine Verdoppelung oder das Verschwinden des chiralen Kondensats vorhersagen. Die Frage, ob experimentelle Realisierungsmöglichkeiten bestehen, kann an dieser Stelle nicht beantwortet werden, ist jedoch für zukünftige Forschung interessant.

A Konventionen

Im Folgenden werden die Konventionen dargestellt, welche innerhalb der Masterarbeit verwendet wurden. Als Metrkik wurde $g = diag(-,+,+,+)$ verwendet. Für den Feldstärketensor verwenden wir damit:

$$\begin{pmatrix} 0 & E_1 & E_2 & E_3 \\ -E_1 & 0 & B_3 & -B_2 \\ -E_2 & -B_3 & 0 & B_1 \\ -E_3 & B_2 & -B_1 & 0 \end{pmatrix} \tag{A.1}$$

und als dualen Feldstärketensor $*F^{\mu\nu} = \frac{1}{2}\epsilon^{\mu\nu\rho\sigma}F_{\rho\sigma}$. Die kovariante Ableitung schreiben wir als $D_\mu = (\partial_\mu - ieA_\mu)$, woraus sich der Kommutator

$$[D_\mu, D_\nu] = -ieF_{\mu\nu}. \tag{A.2}$$

ergibt. Die γ- Matrizen sollen die Dirac-Algebra

$$\{\gamma_\mu, \gamma_\nu\} = -2g_{\mu\nu} \tag{A.3}$$

in $d = 3 + 1$ erfüllen. Der Antikommutator der γ-Matrizen wird als

$$\sigma^{\mu\nu} = \frac{1}{2}[\gamma^\mu, \gamma^\nu] \tag{A.4}$$

definiert. Die chirale Matrix wird gemäß $\gamma_5 = i\gamma_1\gamma_2\gamma_3\gamma_4$ definiert und antikommutiert mit sämtlichen γ-Matrizen.
Wir setzen außerdem $\hbar = c = 1$ und rechnen demnach in natürlichen Einheiten.
Bei der Ableitung nach Grassmanfeldern benutzen wir die Linksableitung:

$$\frac{\delta(\eta\theta)}{\delta\eta} = -\frac{\delta(\theta\eta)}{\delta\eta} = \theta. \tag{A.5}$$

B Integrale

B.1 Chirales Kondensat 1

In Kapitel 3 gilt es für $d = 3$ das Integral

$$\int_0^\infty \frac{dT}{T^{\frac{d}{2}-1}} e^{-m^2 t} \frac{a}{\sinh(aT)} \cosh(bT) = \frac{a}{2} \int_0^\infty \frac{dT}{T^{\frac{d}{2}-1}} e^{-m^2 t} \frac{e^{bT} + e^{-bT}}{\sinh(aT)} \tag{B.6}$$

zu lösen. Dazu wenden wir die ϵ-Integrationstechnik [19] an. Dazu wenden wir die Formel 3.552.1 aus [31]

$$\int_0^\infty dx \frac{x^{\mu-1}e^{-\beta x}}{\sinh(x)} = 2^{1-\mu}\Gamma(\mu)\zeta\left(\mu, \frac{1}{2}(\beta+1)\right), \quad \Re(\mu) > 1,\ \Re(\beta) > -1. \tag{B.7}$$

auf die beiden Terme in Gleichung $(B.5)$ an. Damit erhalten wir:

$$\begin{aligned}\frac{a}{2}\int_0^\infty dT\frac{e^{-m^2T}}{T^{\frac{d}{2}-1}}\frac{e^{\pm bT}}{\sinh(aT)} &\overset{aT=x}{=} \frac{a^{2-\frac{d}{2}}}{2}\int_0^\infty \frac{dx}{x^{\frac{d}{2}-1}}\frac{e^{-(m^2\mp b)\frac{x}{a}}}{\sinh(x)} \\ &= lim_{\epsilon\to 0}\frac{a^{2-\frac{d}{2}}}{2}\int_0^\infty dx\; x^{\epsilon-\left(\frac{d}{2}-1\right)}\frac{e^{-(m^2\mp b)\frac{x}{a}}}{\sinh(x)}\end{aligned} \tag{B.8}$$

mit $\mu - 1 = \epsilon - \left(\frac{d}{2}-1\right)$ und $\beta_\pm x = \frac{(m^2\mp b)}{a}x$. Es folgt also mit $(B.6)$

$$lim_{\epsilon\to 0}\frac{a^{2-\frac{d}{2}}}{2}2^{1-\mu}\Gamma(\mu)\zeta\left(\mu,\frac{1}{2}\left(\beta_\pm+1\right)\right) = \frac{a^{2-\frac{d}{2}}}{\sqrt{2}}\sqrt{\pi}\zeta\left(2-\frac{d}{2},\frac{1}{2}\left(\frac{m^2\mp b}{a}+1\right)\right) \tag{B.9}$$

Für $(B.5)$ ergibt sich also

$$\int_0^\infty \frac{dT}{T^{\frac{d}{2}-1}}e^{-m^2t}\frac{a}{\sinh(aT)}\cosh(bT) = \frac{a^{2-\frac{d}{2}}}{\sqrt{2}}\sqrt{\pi}\sum_{\lambda=\pm}\zeta\left(2-\frac{d}{2},\frac{1}{2}\left(\frac{m^2+\lambda b}{a}+1\right)\right) \tag{B.10}$$

mit $d = 3$. Wir wollen an dieser Stelle noch anmerken, dass das die Integrale in $(B.7)$ für $\epsilon \to 0$ gemäß $(B.6)$ im Allgemeinen nicht wohldefiniert sind, die Summe $(B.9)$ der Integrale als analytische Fortsetzung für sämtliche μ-Werte jedoch exisitiert.
Alternativ lässt sich diese Form auch durch direkte Anwendung der Integraldarstellung der ζ-Funktion

$$\zeta(s,q) = \frac{1}{\Gamma(s)}\int_0^\infty \frac{T^{s-1}e^{-qT}}{1-e^{-T}}, \Re(s)>1, \Re(q)>0 \tag{B.11}$$

erreichen. Dazu schreiben wir

$$\begin{aligned}\int_0^\infty dT\frac{e^{-m^2T}}{\sqrt{T}}\frac{e^{\pm bT}}{e^{aT}-e^{-aT}} &= \int_0^\infty dT\frac{1}{\sqrt{T}}\frac{e^{-(m^2\mp b+a)T}}{1-e^{-2aT}} = \frac{1}{\sqrt{2a}}\int_0^\infty dx\frac{1}{\sqrt{x}}\frac{e^{-\frac{1}{2}\left(\frac{m^2\mp b}{a}+1\right)x}}{1-e^{-x}} \\ &= \frac{1}{\sqrt{2a}}\Gamma\left(\frac{1}{2}\right)\zeta\left(\frac{1}{2},\frac{1}{2}\left(\frac{m^2\mp b}{a}+1\right)\right).\end{aligned} \tag{B.12}$$

Ein weiteres benötiges Integral ergibt sich analog mit Hilfe der ϵ-Integrationstechnik:

$$\int_0^\infty dT e^{-m^2T}\cdot T^{-\frac{3}{2}} = m\cdot\Gamma\left(-\frac{1}{2}\right). \tag{B.13}$$

B.2 Chirales Kondensat 2

Wir wollen zeigen, dass das chirale Kondensat im masselose Limes

$$\langle\overline{\psi}\psi\rangle|_{m\to 0} = -\frac{sign(m)}{2\pi}e^{2B_1\left(\frac{\lambda_B}{2\pi}\right)^2\cos\left(\frac{2\pi}{\lambda_B}x\right)}\int_{-\infty}^\infty dp\frac{e^{-\frac{\left(\overline{B}x-p\right)^2}{\overline{B}}}}{\int_{-\infty}^\infty dx' e^{-\frac{\left(\overline{B}x'-p\right)^2}{\overline{B}}}e^{2B_1\frac{\lambda_B}{2\pi}^2\cos\left(\frac{2\pi}{\lambda_B}x'\right)}} \tag{B.14}$$

für große Wellenlängen in die Proportionalität zum B-Feld übergeht. Dafür bringen wir das p-Integral zunächst einmal auf eine geeigenete Form, um die Laplace-Methode zur asymptotischen

Approximation des Integrals anwenden zu können. Dies gelingt uns indem wir nacheinander die Substitutionen $p^{'} = \sqrt{\overline{B}}x - \frac{p}{\sqrt{\overline{B}}}$, $x^{''} = \frac{2\pi}{\lambda_B}x^{'}$, $p = \frac{2\pi}{\lambda_B}p^{'}$ sowie $x^{'} = x^{''} - \frac{2\pi}{\lambda_B}x$ ausführen. Somit erhalten wir für das p-Integral

$$\sqrt{\overline{B}}\int_{-\infty}^{\infty} dp \frac{1}{\int_{-\infty}^{\infty} dx' e^{-\left(\frac{\lambda_B}{2\pi}\right)^2\left(\left(\sqrt{\overline{B}}x'-p\right)^2-p^2-2B_1\cos\left(x'+\frac{2\pi}{\lambda_B}x\right)\right)}}. \tag{B.15}$$

Das Normierungsintegral können wir mit Hilfe der Laplace Methode für asymptotisch große λ_B lösen. Dazu verwenden wir:

$$\int_a^b dx\ e^{Mf(x)} = \sqrt{\frac{2\pi}{M|f''(x_0)|}}e^{Mf(x)}, \qquad M \to \infty, \tag{B.16}$$

wobei x_0 der Punkt ist an dem die Funktion $f(x)$ ihr Maximum annimmt. Folglich müssen wir

$$\frac{df(x^{'})}{dx^{'}} = -2\sqrt{\overline{B}}\left[\sqrt{\overline{B}}x^{'} - p\right] - 2B_1\sin\left(x^{'} + \frac{2\pi}{\lambda_B}x\right) \stackrel{!}{=} 0 \tag{B.17}$$

nach x auflösen. Dies gelingt nicht, es zeigt sich allerdings, dass zur Lösung des p-Integrals mittels Laplace-Methode die implizite Angabe

$$p = \sqrt{\overline{B}}x_0^{'} + \frac{B_1}{\sqrt{\overline{B}}}\sin\left(x_0^{'} + \frac{2\pi}{\lambda_B}x\right) \tag{B.18}$$

mit der Lösung $x_0^{'}$ der Gleichung (B.17) ausreichend ist. Zunächst einmal brauchen wir allerdings noch

$$\frac{d^2f(x^{'})}{dx^{'2}} = -2\overline{B} - 2B_1\cos\left(x^{'} + \frac{2\pi}{\lambda_B}x\right). \tag{B.19}$$

Unter Verwendung von Gleichung (B.16) erhalten wir dann für (B.15):

$$\sqrt{\frac{\overline{B}}{\pi}}\frac{\lambda_B}{2\pi}\int_{\infty}^{\infty} dp\ \frac{\exp\left(\left(\frac{\lambda_B}{2\pi}\right)^2\left[\left(\overline{B}x_0^{'}(p) - p\right)^2 - p^2 - 2B_1\cos\left(x_0^{'}(p) + \frac{2\pi}{\lambda_B}x\right)\right]\right)}{\sqrt{\overline{B} + B_1\cos\left(x_0^{'}(p) + \frac{2\pi}{\lambda_B}x\right)}^{-1}}. \tag{B.20}$$

Dieses Integral ist wiederum geeignet für die Anwendung der Laplace-Methode

$$\int_a^b dp\ e^{Mf(p)}g(p) = \sqrt{\frac{2\pi}{M|f''(p_0)|}}e^{Mf(p_0)}g(p_0), \qquad M \to \infty. \tag{B.21}$$

Wir leiten also die Funktion $f(p)$ nach p ab, wobei wir x_0 gemäß Gleichung (B.18) als Funktion von p auffassen. Wir nehmen die Umbenennung $x_0^{'} \to x_0$ vor und kennzeichnen die Ableitung nach p nun durch einen Strich. Damit erhalten wir:

$$f^{'}(p) = 2\overline{B}x_0(p)x_0^{'}(p) - 2\sqrt{\overline{B}}x_0^{'}(p)p - 2\sqrt{\overline{B}}x_0(p) + 2B_1x_0^{'}(p)\sin\left(x_0(p) + \frac{2\pi}{\lambda_B}x\right) \stackrel{!}{=} 0. \tag{B.22}$$

Durch Einsetzen von (B.18) für p im zweiten Term ergibt sich folglich:

$$x_0(p_0) = 0. \tag{B.23}$$

Wir benötigen noch die zweite Ableitung von $f(p)$. Mit Hilfe von $(B.18)$ und $(B.23)$ erhalten wir

$$f^{''}(p_0) = 2\overline{B}x^{'}(p_0)^2 + 2B_1 \cos\left(\frac{2\pi}{\lambda_B}x\right) x^{'}(p_0)^2 - 4\sqrt{\overline{B}}x_0^{'}(p_0). \tag{B.24}$$

Ableiten von Gleichung $(B.18)$ nach x_0 ergibt

$$x_0^{'}(p_0) = \frac{\sqrt{\overline{B}}}{\overline{B} + B_1 \cos\left(\frac{2\pi}{\lambda_B}x\right)} \tag{B.25}$$

und durch Einsetzen in $(B.24)$ ergibt sich folglich

$$f^{''}(p_0) = \frac{-2\overline{B}}{\overline{B} + B_1 \cos\left(\frac{2\pi}{\lambda_B}x\right)}. \tag{B.26}$$

Mit $(B.14)$ und $(B.21)$ erhalten wir demzufolge

$$\langle\overline{\psi}\psi\rangle|_{m\to 0} = -\frac{sign(m)}{2\pi}\left(\overline{B} + B_1 \cos\left(\frac{2\pi}{\lambda_B}x\right)\right) = -\frac{sign(m)}{2\pi}B(x). \tag{B.27}$$

Mit der Substitution $p := \frac{\sqrt{\overline{B}}2\pi}{\lambda_B}p^{'}$ lässt sich die Rechnung ab $(B.15)$ analog für $\overline{B} \to \infty$ statt $\left(\frac{\lambda_B}{2\pi}\right)^2 \to \infty$ durchführen, was ebenfalls auf $(B.27)$ führt. Das wiederum entspricht einer Näherung des chiralen Kondensats für großen Fluss.

C Spinfaktor

Für konkrete numerische Berechnungen ist es sinnvoll den Spinfaktor

$$tr_\gamma \mathcal{P} e^{\frac{ie}{2}\int_0^T d\tau \sigma^{\mu\nu}F_{\mu\nu}} \tag{C.28}$$

auf eine geeignetere Form zu bringen. Dazu merken wir an, dass sich eine Exponentialfunktion wie in $(C.27)$ über eine Fierz-Transformation mit Hilfe der Basis der Dirac-Algebra darstellen lässt

[19][9]:

$$e^{\frac{ie}{2}s\sigma F} = S + \frac{ie}{2}T\sigma F - iP\gamma_5 + \frac{e}{2}T^*\gamma_5\sigma F$$

$$\begin{aligned}
&S = \cos(esa)\cosh(esb),\ S = \sin(esa)\sinh(esb)\\
&T = \frac{1}{e(a^2+b^2)}(a\cdot\sin(esa)\cosh(esb) + b\cdot\cos(esa)\sinh(esb))\\
&T^* = \frac{1}{e(a^2+b^2)}(b\cdot\sin(esa)\cosh(esb) - a\cdot\cos(esa)\sinh(esb))\\
&a = \sqrt{\sqrt{x^2+y^2}+x},\quad b = \sqrt{\sqrt{x^2+y^2}-x}
\end{aligned} \tag{C.29}$$

$$x = \frac{1}{4}F^{\mu\nu}F_{\mu\nu},\quad y = \frac{1}{4}F^*_{\mu\nu}F^{\mu\nu}$$

$$F^{\mu\nu} = \begin{pmatrix} 0 & E_1 & E_2 & E_3\\ -E_1 & 0 & B_3 & -B_2\\ -E_2 & -B_3 & 0 & B_1\\ -E_3 & B_2 & -B_1 & 0 \end{pmatrix}$$

In unserem Fall müssen wir folglich die Exponentialfaktoren in

$$tr_\gamma \mathcal{P} e^{\frac{ie}{2}\frac{T}{N}\sum_{k=1}^N \sigma^{\mu\nu}F_{\mu\nu}(y_k\sqrt{T}+x_{\mathrm{CM}})} = tr_\gamma \prod_{k=1}^N e^{\frac{ie}{2}\frac{T}{N}\sigma^{\mu\nu}F_{\mu\nu}(y_k\sqrt{T}+x_{\mathrm{CM}})} \tag{C.30}$$

ausmultiplizieren. Hierbei haben wir gleich verwendet, dass die Pfadordnung vernachlässigt werden kann, da die Loops in unserem Fall ohnehin pfadgeordnet erzeugt werden. Im Fall eines uniaxialen B-Feldes $\vec{B} = B(x,y)\vec{e}_Z$, wie es z.B in Kap. 2.5 betrachtet wird, erhalten wir z.B.

$$F^{\mu\nu}F_{\mu\nu} = 2B(x,y),\ F^*_{\mu\nu}F^{\mu\nu} = 0 \Rightarrow x = \frac{1}{2}B(x,y),\ y = 0 \Rightarrow a = B(x,y),\ b = 0 \tag{C.31}$$

$$\tag{C.32}$$

Damit erhalten wir die Koeffizienten

$$S = \cos(esB),\quad P = 0,\quad T = \frac{1}{eB}\sin(esB),\quad T^* = 0 \tag{C.33}$$

und es folgt

$$e^{\frac{ie}{2}s\sigma F} = \cos(esB) + i\sigma_3\sin(esB). \tag{C.34}$$

Gemäß (C.29) müssen wir nun die Exponentialfunktionen an den einzelnen Punkten $\vec{x}_i$ im Magnetfeld ausmultiplizen. Wir führen die Bezeichnung $cos_i := \cos(e\frac{T}{N}B(x_i,y_i))$ und $sin_i := \sin(e\frac{T}{N}B(x_i,y_i))$ ein und schreiben (C.29) als

$$tr_\gamma \prod_{k=1}^N (cos_k + \sigma_3 sin_k) = tr_\gamma\left(cos_{\sum_{k=1}^N k} + \sigma_3 sin_{\sum_{k=1}^N k}\right) = 4\cdot cos_{\sum_{k=1}^N k}, \tag{C.35}$$

[9] Entgegen unserer Konvention wurde der Kommutator der Dirac-Algebra hier gemäß $\sigma_{\mu\nu} = \frac{i}{2}[\gamma_\mu,\gamma_\nu]$. Die zusätzliche imaginäre Einheit führt dazu, dass im Endergebnis der Cosinus durch einen Cosinushyperbolicus ersetzt werden muss.

wobei wir die trigonometrischen Addtionstheoreme paarweise gemäß

$$(cos_x + \sigma_3 sin_x)(cos_y + \sigma_3 sin_y) = \underbrace{(cos_x cos_y - sin_x sin_y)}_{cos_{x+y}} + i\sigma_3 \underbrace{(sin_x cos_y - sin_y cos_x)}_{sin_{x+y}} \tag{C.36}$$

verwendet haben. Somit können wir den Spinfaktor für uniaxiale B-Felder schreiben als

$$\begin{aligned} tr_\gamma \mathcal{P} e^{\frac{ie}{2}\frac{T}{N}\sum_{k=1}^{N}\sigma^{\mu\nu}F_{\mu\nu}(y_k\sqrt{T}+x_{\mathrm{CM}})} &= 4\cdot\cos\left(eT\frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N}B(x_i,y_i)\right) \\ &= 4\cdot\cos\left(eT\int_0^1 B(x(t),y(t))dt\right). \end{aligned} \tag{C.37}$$

Für allgemeine B-Felder wird der Spinfaktor nicht diese einfache Form annehmen, da die Exponentialfunktion in $(C.29)$ eine kompliziertere Darstellung hat, sodass die Matrixmultiplikation und Spurbildung in $(C.29)$ numerisch ausgeführt werden muss.

D Diagonalform

Zusammengefasst und im Sinne eines Quellcodes zu verstehen sieht der Algorithmus aus Kap. 2.7 wie folgt aus:

1. Einlesen der Koeffizienten $a_{i,j}$ der quadratischen Form (64) in ein Array.
2. Für $k = 2,\ 3, ...2N-2;\ \ i = k,\ k+1,\ ...2N-2$ und falls $a_{k,i+1} \neq 0$:
   a) Berechnung der Substitutionskoeffizienten

$$c_{i,k} = \frac{1}{2}\frac{a_{k,i+1}}{a_{k,k}} \tag{D.38}$$

   b) Neuberechnung der Koeffizienten der quadratischen Form:

$$a_{i+1,i+1} = a_{k,k}\cdot c_{i,k}^2 - a_{k,i+1}\cdot c_{i,k} + a_{i+1,i+1} \tag{D.39}$$

   für $j = k+1,\ k+2,\ ...2N-1$

$$\begin{aligned} a_{k,j} &= a_{k,j} \\ a_{i+1,j} &= -c_{i,k}\cdot a_{k,j} + a_{i+1,j}, \quad falls \ \ j > i+1 \end{aligned} \tag{D.40}$$

3. Gaußverteilte Zufallszahlen s_i für $i = 2,\ 3,\ ...2N-1$ erzeugen.
4. Normierung der Zufallszahlen gemäß

$$y_i^{(2N-1-i)} = \frac{2}{\sqrt{N a_{i,i}}} s_i, \quad i = 2N-1,\ 2N-2,\ ...2. \tag{D.41}$$

5. Inversion der Transformation (67) bis (70) mit Hilfe der Koeffizienten $(D.38)$ und der Zufallszahlen (D.41).

6. Aufteilung der Punkte $y_J = y_2^{(0)}, \ ..., y_{2N-1}^{(0)}$ auf Dimensionen $\mu = 1;\ 2$ gemäß

$$y_{\mu,i}, \quad J = 2i + \mu - 1, \quad i = 0, 1, ...N. \tag{D.42}$$

7. Für jeden Loop ab Schritt 3 wiederholen.

8. Für jedes T ab Schritt 1 wiederholen.

E 2+1 dimensionale QED in Graphen

Wir wollen an dieser Stelle *kurz* auf wichtige Aspekte der Gitterstruktur des Graphengitters und der daraus resultierenden Beschreibung niederenergetischer Anregungen durch eine paritätsinvariante QED_{2+1}-Lagrangedichte eingehen. Für ausführlichere Informationen sei auf die Reviews [38, 6] verwiesen.
Der Graphenkristall ist aus einem periodisch angeordneten, hexagonalen Gitter mit einem Kohlenstoffatom an jedem Gitterpunkt aufgebaut. Für die Beschreibung der Kristallstruktur bzw. elektronischer Eigenschaften wird jedoch im Allgemeinen auf zwei dreieckige Untergitter A und B zurückgegriffen, deren Atome jeweils mit drei Atomen des anderen Gitters benachbart sind. Die Verbindung zu den Nachbaratomen wird dabei durch drei Vektoren $\vec{\delta}_i$ beschrieben. Eine Einheitszelle beherbergt jeweils ein Atom der beiden Untergitter. Das reziproke Gitter ist wiederum hexagonal. Von den 6 Eckpunkten eines Hexagons sind jedoch aufgrund der Gittersymmetrie nur zwei Punkte inequivalent, da sie nicht durch die reziprioken Basisvektoren mit ganzzahligen Koeffizienten miteinander verbunden werden können. Die zwei Eckpunkte können dabei so gewählt werden, dass sie von einer erweiterten Brillouinzone umschlossen werden. Wir halten uns in diesem Abschnitt an die Konventionen aus [38].

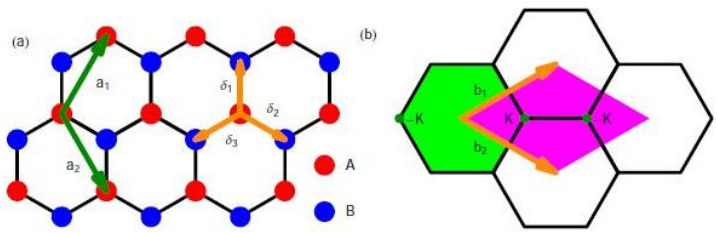

Abbildung 16: Entnommen aus Ref. [38]. (a) Graphengitter mit zwei Untergittern A und B, den Basisvektoren $\vec{a}_1$ und $\vec{a}_2$, sowie den nächste-Nachbarn Verbindungsvektoren $\vec{\delta}_i,\ i = 1,\ 2,\ 3$. Eine waagerechte Achse entspricht der zigzag-Richtung des Graphengitters. (b) Reziprokes Gitter mit der Brillouinzone (grün) und der erweiterten Brillouinzone (pink), welche die beiden inequivalenten Dirac-Punkte $K =: K_+$ und $-K =: K_-$ umschließt.

Allgemeiner Ausgangspunkt der Beschreibung der elektronischen Eigenschaften von Graphen ist der Tight-Binding-Hamiltonoperator

$$H_0 = -t_0 \sum_{\vec{n},\vec{\delta},\sigma} a^\dagger_{\sigma,\vec{n}} b_{\sigma,\vec{n}+\vec{\delta}} + b^\dagger_{\sigma,\vec{n}+\vec{\delta}} a_{\sigma,\vec{n}}, \tag{E.43}$$

hier in der 2. Quantisierung mit der nächste-Nachbarn-Hopping-Energie t_0. Hierbei wird über sämtliche Orte $\vec{n}$ an den sich Atome des Untergitteratoms A befinden summiert. So erzeugen z.B. die Operatoren $a^\dagger_{\sigma,\vec{n}}$ auf dem Gitter A bei $\vec{n}$ ein Elektron mit dem Spin σ und $b_{\sigma,\vec{n}+\vec{\delta}}$ vernichten entsprechend ein Elektron bei $\vec{n}+\vec{\delta_i}$ aus dem Untergitter B. Aus dem Tight-Binding-Hamiltonoperator lässt sich die Dispersionsrelation [57, 38]

$$E(\vec{k}) = \pm t_0 \sqrt{1 + 4cos^2\left(\frac{k_x a}{2}\right) + 4cos\left(\frac{k_x a}{2}\right)\cos\left(\frac{\sqrt{3}k_y a}{2}\right)} \tag{E.44}$$

ableiten. In den 6 Eckpunkten der Brillouinzone $\vec{K}_i,\ i = 1,\ ..., 6$ laufen Leitungs- und Valenzband konisch zusammen: $E(\vec{K}_i) = 0$. Durch Verwendung der Impulsraumdarstellung der Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren kann der Hamiltonoperator $(E.43)$ in der Form [38]

$$\begin{aligned} H_0 &= \sum_\sigma \int_{BZ} \frac{d^2k}{2\pi} \begin{pmatrix} a^\dagger_\sigma(\vec{k}) & b^\dagger_\sigma(\vec{k}) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & \phi(\vec{k}) \\ \phi^*(\vec{k}) & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_\sigma(\vec{k}) \\ b_\sigma(\vec{k}) \end{pmatrix} \\ \phi(\vec{k}) &= -t_0 \sum_{\vec{\delta}_i} e^{i\vec{k}\vec{\delta}_i} \end{aligned} \tag{E.45}$$

geschrieben werden, wobei die Impulsintegration über die Brillouinzone „BZ" geschieht. Entwickelt man überdies $\phi(\vec{k})$ nahe der beiden Dirac-Punkten: $\vec{K}_\pm + \vec{p}$ mit $|\vec{p}| \ll 1$, lässt sich der Hamiltonoperator darstellen als [38][10]:

$$\begin{aligned} H_0 &= \hbar v_F \sum_\sigma \int_{DC} \frac{d^2p}{(2\pi)^2} \Psi^\dagger_\sigma(\vec{p})(\alpha^1 p_1 + \alpha^2 p_2)\Psi_\sigma(\vec{p}), \quad \vec{\alpha} = (\alpha^1, \alpha^2, \alpha^3) = \begin{pmatrix} \vec{\tau} & 0 \\ 0 & -\vec{\tau} \end{pmatrix}, \\ \Psi^T_\sigma &= (\Psi^T_{K_{\sigma,+}}, \Psi^T_{K_{\sigma,-}}) = (a_\sigma(\vec{K}_+ + \vec{p}), b_\sigma(\vec{K}_+ + \vec{p}), b_\sigma(\vec{K}_- + \vec{p}), a_\sigma(\vec{K}_- + \vec{p})), \end{aligned} \tag{E.46}$$

wobei die beiden Blöcke von H_0 sich auf jeweils einer der Dirac-Punkte $\vec{K}_\pm$ beziehen. Hierbei erfolgt Impulsintegration über den Dirac-Kegel „DC". Unter Einbeziehung der Wechselwirkung mit einem Eichfeld lässt sich aus diesem Hamiltonoperator eine paritätsinvariante QED_{2+1} Lagrangedichte für zwei Fermionen mit der Fermigeschwindigkeit v_F ableiten [38][11]:

$$\mathcal{L} = \sum_\sigma \overline{\Psi}_\sigma(t, \vec{x})[i\hbar\gamma^0\partial_t + i\hbar v_F \gamma^1 D_x + i\hbar v_F \gamma^2 D_y]\Psi_\sigma(t, \vec{x}), \quad \overline{\Psi}_\sigma = \Psi^\dagger_\sigma \gamma^0 \tag{E.47}$$

mit $D_i = \partial_i - \frac{ie}{\hbar c} A_i$. Mit der Darstellung

$$\gamma^\nu = \tilde{\tau}_3 \otimes (\tau_3, i\tau_2, -i\tau_1), \quad \nu = 0,\ 1,\ 2; \quad \gamma^3 = \begin{pmatrix} 0 & I \\ -I & 0 \end{pmatrix}, \quad \gamma^5 = \begin{pmatrix} 0 & I \\ I & 0 \end{pmatrix}, \tag{E.48}$$

wobei $\tilde{\tau}$ in den $\vec{K}_\pm$-Unterräumen wirkt, ist dieser formal äquivalent zur Lagrangedichte (89) mit $m = 0$ und vertauschter $x-$ und $y-$Achse.
Die Paritätstransformation des Graphengitters bzw. Tight-Binding Models invertiert *beide* Achsen (vgl. (81)), wobei der Koordinatenursprung in der Mitte eines Hexagons liegt, und vertauscht sowohl A und B Atome, als auch die beiden Dirac-Punkte $\vec{K}_\pm$ miteinander [38]. Bei Einführung eines Massenterms in $(E.47)$ müssen daher an beiden Dirac-Punkten Massen mit entgegengesetzten Vorzeichen eingeführt werden in Übereinstimmung mit (89). Es kann deshalb bei der Berechnung

[10] Die τ-Matrizen entsprechen hier den bekannten Pauli-Matrizen $\sigma_i,\ i = 1,\ 2,\ 3$.
[11] Das chemische Potential spielt in unseren Betrachtungen keine Rolle, weshalb wir dieses weglassen.

des chiralen Kondensats in Graphen auf die Betrachtungen aus Kap. 3 zurückgegriffen werden.
Eine interessante Eigenschaft des Graphens stellen die durch mechanische Spannung erzeugbaren Pseudo-Magnetfelder dar. Diese resultieren aus deformationsbedingten Abstandsänderungen der für das Tight-Binding Model wesentlichen p_z-Orbitale und der damit verbundenen Änderungen der nächste-Nachbarn-Hopping-Energie t_0 [6]. Das einen zusätzlichen Term in $(E.43)$ zur Folge, der im Ortsraum näherungsweise geschrieben werden kann als [6]

$$H_{od} = \sum_{\lambda=\pm} \lambda \int d^2\vec{x} \left[\Psi^\dagger_{\sigma,K_\lambda}(\vec{x})\vec{\sigma}\vec{A}(\vec{x})\Psi_{\sigma,K_\lambda}(\vec{x})\right] \tag{E.49}$$

mit den Paulimatrizen $\vec{\sigma}$ und $\vec{A} = (A_x, A_y)$. Die Deformation des Graphens hat also an den beiden Dirac-Punkten im Gegensatz zum realen Eichpotential entgegengesetzte Vorzeichen zur Folge, was für Berechnungen entsprechend in der Lagrangedichte $(E.47)$ berücksichtigt werden muss und in Kap. 3.2.2 konkret diskutiert wurde.
Das Eichpotential selbst kann mit dem Verschiebungsfeld $\vec{u}(\vec{x}) = (u_1(\vec{x}), u_2(\vec{x}))$, welches die Auslenkung der Gitteratome zu ihrer ursprünglichen Lage im nichtdeformierten Gitter beschreibt, verknüpft werden. Bei Ausrichtung der x_1-Achse entlang der zigzag-Richtung des Graphengitters lautet der Zusammenhang [6, 33, 32]

$$\begin{aligned} A_1 &= \pm c\frac{\beta}{a}(v_{11} - v_{22}) \\ A_2 &= \mp 2c\frac{\beta}{a}v_{12} \end{aligned} \tag{E.50}$$

mit $\beta \approx 2$, einer dimensionlosen Konstanten c, welche von mikroskopischen Details der atomaren Verschiebung abhängt, und dem Spannungstensor

$$v_{ij} = \frac{1}{2}\left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_j}\right), \quad x_1 = x, \quad x_2 = y. \tag{E.51}$$

Die unterschiedlichen Vorzeichen in $(E.50)$ beziehen sich auf jeweils einen der beiden inequivalenten Dirac-Punkte. Das Vorzeichen des Magnetfeldes an den Dirac-Punkten kann folglich durch Inversion des Verschiebungsfeldes $\vec{u}(\vec{x}) \to -\vec{u}(\vec{x})$ umgekehrt werden.
Das Verschiebungsfeld, welches eine Deformation wie in Abb. 3 in Kap 2.6 beschreibt, lautet [6, 33, 32]

$$\begin{aligned} u_x(x,y) &= (R+y)\sin\left[\frac{2x}{W}arcsin\left(\frac{W}{2R}\right)\right] - x, \\ u_y(x,y) &= (R+y)\cos\left[\frac{2x}{W}arcsin\left(\frac{W}{2R}\right)\right] - R - y \end{aligned} \tag{E.52}$$

und führt mittels $(E.50)$ auf das Pseudo-Magnetfeld

$$B_P(x,y) = -4c\frac{\beta\Phi_0}{a_0 W}arcsin\left(\frac{W}{2R}\right)\cos\left[\frac{2x}{W}arcsin\left(\frac{W}{2R}\right)\right]\cdot\left[1 - \frac{R+y}{W}arcsin\left(\frac{W}{2R}\right)\right], \tag{E.53}$$

mit dem Flussquant Φ_0, dem Kohlenstoffatomabstand in Graphen a_0, der Breite der Graphenprobe W und dem inneren Radius der gekrümmten Probe R. In der Näherung schwacher Krümmung $\frac{W}{R} \ll 1$ kann das aus $(E.52)$ resultierende Eichpotential $(E.50)$ entsprechend durch (51) genähert werden[32, 7].

Literatur

[1] Y. Aharonov and A. Casher. The ground state of a spin 1/2 charged particle in a two-dimensional magnetic field. *Phys.Rev.*, A19:2461–2462, 1979.

[2] T. W. Appelquist, M. J. Bowick, D. Karabali, and L. C. R. Wijewardhana. Spontaneous Chiral Symmetry Breaking in Three-Dimensional QED. *Phys.Rev.*, D33:3704, 1986.

[3] C. M. Bender and S. A. Orszag. *Advanced Mathematical Methods for Scientists and Engineers I: Asymptotic Methods and Perturbation Theory: v.1.* Springer, 1999.

[4] Z. Bern and D. A. Kosower. The Computation of loop amplitudes in gauge theories. *Nucl.Phys.*, B379:451–561, 1992.

[5] K. I. Bolotin, F. Ghahari, M. D. Shulman, H. L. Stormer, and P. Kim. Observation of the fractional quantum Hall effect in graphene . *Nature*, 462:196–199, 2009.

[6] A. H. Castro Neto, F. Guinea, N. M. R. Peres, K. S. Novoselov, and A. K. Geim. The electronic properties of graphene. *Rev.Mod.Phys.*, 81:109–162, 2009.

[7] Y. Chang, T. Albash, and S. Haas. Strain-induced quantum hall states in graphene. 2012. arXiv/1205.1169.

[8] P. A. M. Dirac. The Quantum theory of electron. *Proc.Roy.Soc.Lond.*, A117:610–624, 1928.

[9] P. A. M. Dirac. Quantized Singularities in the Electromagnetic Field. *Proc.Roy.Soc.Lond.*, A133:60–72, 1931.

[10] W. Dittrich. One Loop Effective Potentials in QED. *J.Phys.A*, A9:1171, 1976.

[11] W. Dittrich and M. Reuter. Effective Lagrangians in Quantum Electrodynamics. *Lect.Notes Phys.*, 220:1–244, 1985.

[12] X. Du, I. Skachko, F. Duerr, A. Luican, and E. Y. Andrei. Fractional quantum Hall effect and insulating phase of Dirac electrons in graphene . *Nature*, 462:192–195, 2009.

[13] G. Dunne, H. Gies, K. Klingmueller, and K. Langfeld. Worldline Monte Carlo for fermion models at large N(f). *JHEP*, 0908:010, 2009.

[14] G. V. Dunne. The Heisenberg-Euler Effective Action: 75 years on. *Int.J.Mod.Phys.*, A27:1260004, 2012.

[15] G. V. Dunne and T. Hall. Inhomogeneous condensates in planar QED. *Phys.Rev.*, D53:2220–2226, 1996.

[16] R. P. Feynman. Mathematical formulation of the quantum theory of electromagnetic interaction. *Phys.Rev.*, 80:440–457, 1950.

[17] J. N. Fuchs and P. Lederer. Charge density wave in graphene: magnetic-field-induced peierls instability. Technical Report cond-mat/0612386, Dec 2006. arXiv:cond-mat/0612386v1.

[18] K. Fujikawa. Path Integral Measure for Gauge Invariant Fermion Theories. *Phys.Rev.*, 42:1195, 1979.

[19] H. Gies. *Probing the quantum vacuum. Perturbative effective action approach in QED and QCD and its applications.* PhD thesis, Universitaet Tuebingen, 1999.

[20] H. Gies. Introduction to the functional RG and applications to gauge theories. 2006. arXiv:hep-ph/0611146.

[21] H. Gies and K. Klingmueller. Pair production in inhomogeneous fields. *Phys.Rev.*, D72:065001, 2005.

[22] H. Gies and K. Langfeld. Quantum diffusion of magnetic fields in a numerical worldline approach. *Nucl.Phys.*, B613:353–365, 2001.

[23] H. Gies and K. Langfeld. Loops and loop clouds: A Numerical approach to the worldline formalism in QED. *Int.J.Mod.Phys.*, A17:966–978, 2002.

[24] H. Gies, K. Langfeld, and L. Moyaerts. Casimir effect on the worldline. *JHEP*, 0306:018, 2003.

[25] H. Gies and L. Roessler. Vacuum polarization tensor in inhomogeneous magnetic fields. *Phys.Rev.*, D84:065035, 2011.

[26] M. O. Goerbig and N. Regnault. Theoretical Aspects of the Fractional Quantum Hall Effect in Graphene. *Phys.Scripta*, T146:014017, 2012.

[27] E. V. Gorbar, V. P. Gusynin, and V. A. Miransky. Toward theory of quantum Hall effect in graphene. *Low Temp.Phys.*, 34:790, 2008.

[28] E. V. Gorbar, V. P. Gusynin, V. A. Miransky, and I. A. Shovkovy. Magnetic field driven metal insulator phase transition in planar systems. *Phys.Rev.*, B66:045108, 2002.

[29] E. V. Gorbar, V. P. Gusynin, V. A. Miransky, and I. A. Shovkovy. Dynamics in the quantum Hall effect and the phase diagram of graphene. *Phys.Rev.*, B78:085437, 2008.

[30] E. V. Gorbar, V. P. Gusynin, V. A. Miransky, and I. A. Shovkovy. Coulomb interaction and magnetic catalysis in the quantum Hall effect in graphene. *Phys.Scripta*, T146:014018, 2012.

[31] I. S. Gradshteyn and I. M. Rhyzik. *Tables of Integrals, Series, And Products*. Elsevier Academic Press, 2007.

[32] F. Guinea, A. K. Geim, M. I. Katsnelson, and K. S. Novoselov. Generating quantizing pseudomagnetic fields by bending graphene ribbons. *Phys.Rev.*, B81, 2010.

[33] F. Guinea, M. I. Katsnelson, and A. K. Geim. Energy gaps, topological insulator state and zero-field quantum Hall effect in graphene by strain engineering. *Nature Phys.*, 6:30–33, 2010.

[34] V. P. Gusynin, V. A. Miransky, S. G. Sharapov, and I. A. Shovkovy. Excitonic gap, phase transition, and quantum Hall effect in graphene. *Phys.Rev.*, B74:195429, 2006.

[35] V. P. Gusynin, V. A. Miransky, and I. A. Shovkovy. Catalysis of dynamical flavor symmetry breaking by a magnetic field in (2+1)-dimensions. *Phys.Rev.*, 73:3499–3502, 1994.

[36] V. P. Gusynin, V. A. Miransky, and I. A. Shovkovy. Dimensional reduction and catalysis of dynamical symmetry breaking by a magnetic field. *Nucl.Phys.*, B462:249–290, 1996.

[37] V. P. Gusynin and S. G. Sharapov. Unconventional integer quantum Hall effect in graphene. *Phys.Rev.*, 95:146801, 2005.

[38] V. P. Gusynin, S. G. Sharapov, and J. P. Carbotte. AC conductivity of graphene: from tight-binding model to 2+1-dimensional quantum electrodynamics. *Int.J.Mod.Phys.*, B21:4611–4658, 2007.

[39] V. P. Gusynin and I. A. Shovkovy. Derivative expansion for the one loop effective Lagrangian in QED. *Can.J.Phys.*, 74:282–289, 1996.

[40] V. P. Gusynin and I. A. Shovkovy. Derivative expansion of the effective action for QED in (2+1)-dimensions and (3+1)-dimensions. *J.Math.Phys.*, 40:5406–5439, 1999.

[41] W. Heisenberg and H. Euler. Consequences of Dirac's theory of positrons. *Z.Phys.*, 98:714–732, 1936.

[42] F. Karbstein, L. Roessler, B. Dobrich, and H. Gies. Optical probes of the quantum vacuum: The photon polarization tensor in external fields. 2011. arXiv:1111.5984.

[43] K. Klingmueller. Pair Production on the Worldline. Diplomarbeit, Universitaet Heidelberg, 2004.

[44] K. Langfeld, L. Moyaerts, and H. Gies. Fermion induced quantum action of vortex systems. *Nucl.Phys.*, B646:158–180, 2002.

[45] K. Nomura, S. Ryu, and D. Lee. Field-Induced Kosterlitz-Thouless Transition in the N=0 Landau Level of Graphene. *Phys.Rev.*, 103:216801, 2009.

[46] K. S. Novoselov, A. K. Geim, S. V. Morozov, D. Jiang, M. I. Katsnelson, et al. Two-dimensional gas of massless dirac fermions in graphene. *Nature*, 438:197, 2005.

[47] K. S. Novoselov, A. K. Geim, S. V. Morozov, D. Jiang, Y. Zhang, S. V. Dubonos, I. V. Grigorieva, and A. A. Firsov. Electric Field Effect in Atomically Thin Carbon Films. *Science*, 306(5696):666–669, 2004.

[48] R. R. Parwani. On chiral symmetry breaking by external magnetic fields in QED in three-dimensions. *Phys.Rev.*, B358:101–105, 1995.

[49] M. E. Peskin and D. V. Schroeder. *An Introduction to quantum field theory.* Westview Press, 1995.

[50] A. P. Polychronakos. Symmetry breaking patterns in (2+1)-dimensional gauge theories. *Phys.Rev.*, 60:1920, 1988.

[51] M. Schaefer, I. Huet, and H. Gies. Energy-Momentum Tensors with Worldline Numerics. 2011.

[52] C. Schubert. Perturbative quantum field theory in the string inspired formalism. *Phys.Rept.*, 355:73–234, 2001.

[53] J. S. Schwinger. On gauge invariance and vacuum polarization. *Phys.Rev.*, 82:664–679, 1951.

[54] G. W. Semenoff. Condensed Matter Simulation of a Three-Dimensional Anomaly. *Phys.Rev.*, 53:2449, 1984.

[55] Gordon W. Semenoff and Fei Zhou. Magnetic Catalysis and Quantum Hall Ferromagnetism in Weakly Coupled Graphene. *JHEP*, 1107:037, 2011.

[56] M. J. Strassler. Field theory without Feynman diagrams: One loop effective actions. *Nucl.Phys.*, B385:145–184, 1992.

[57] P. R. Wallace. The Band Structure of Graphite. *Phys. Rev.*, 71:622â634, 1947.

[58] V. Weisskopf. The electrodynamics of the vacuum based on the quantum theory of the electron. *Math. Fys. Med. Kgl. Danske Viden. Sel.*, 14:3–39, 1936.

[59] K. Yang, S. Das Sarma, and A. H. MacDonald. Collective modes and skyrmion excitations in graphene SU(4) quantum Hall ferromagnets. *Phys.Rev.*, B74:075423, 2006.

[60] A. Zee. *Quantum Field Theory in a Nutshell*. Princeton University Press, 2010.

[61] Y. Zhang, Z. Jiang, J. P. Small, M. S. Purewal, Y.-W. Tan, M. Fazlollahi, J. D. Chudow, J. A. Jaszczak, H. L. Stormer, and P. Kim. Landau-level splitting in graphene in high magnetic fields. *Phys. Rev.*, 96:136806, Apr 2006.

[62] Y. Zheng and T. Ando. Hall conductivity of a two-dimensional graphite system. *Phys.Rev.*, B65:245420, 2002.

Danksagung

An dieser Stelle möchte ich mich noch bei allen Personen bedanken, die zum gelingen dieser Masterarbeit beigetragen haben. Insbesondere danke ich Professor Gies für die Bereitstellung des interessanten Themas sowie für seine hervorragende Betreuung der Masterarbeit, verbunden mit der Beantwortung zahlreicher Fragen meinerseits.

Ich möchte Dr. Felix Karbstein für zahlreiche Verbesserungsvorschläge danken und dafür, dass er sich bereiterklärt hat, das Zweitgutachten der Masterarbeit zu übernehmen.

Des Weiteren danke ich meiner Familie für finanzielle sowie moralische Unterstützung die mir das Studium der Physik erst ermöglicht hat.

Auch bedanke ich mich noch all meinen Freunden für die zahlreichen Stunden, die wir miteinander verbracht haben, wodurch die Studiumzeit abwechslungsreich gestaltet werden konnte.

Erklärung

Ich erkläre, dass ich die vorliegende Arbeit selbständig verfasst und keine anderen als die angegebenen Quellen und Hilfsmittel benutzt habe.

....
Ort, Abgabedatum Unterschrift des Verfassers

Seitens des Verfassers/Verfasserin bestehen keine Einwände, die vorliegende Masterarbeit für die öffentliche Nutzung in der Thüringer Universitäts- und Landesbibliothek zur Verfügung zu stellen.

Jena,..... .....
. Unterschrift