Das freie Fermionengas bei komplexem Chemischen Potential

Bachelorarbeit

von

Florian Meyer

Fakultät für Physik

Universität Bielefeld

Betreuer und 1. Korrektor: Prof. Edwin Laermann

2. Korrektor: Dr. Christian Schmidt

Erklärung

Hiermit erkläre ich, dass ich die vorliegende Arbeit selbstständig verfasst und dabei keine weiteren als die angegebenen Hilfsmittel verwendet habe.
Bielefeld, 6. Oktober 2009

Florian Meyer

Inhaltsverzeichnis

1 Einleitung

1.1 Quark-Gluon Plasma

In der modernen Physik gibt es viele Beispiele für extreme Zustände von Materie, die im Zentrum der Untersuchungen aktueller Forschung liegen. So befindet sich z.B. in Neutronensternen extrem dichte Materie bei relativ geringen Temperaturen [Kap00]. In Teilchenbeschleunigern wird extrem heiße, aber weniger baryonenreiche Materie erzeugt. Dazu werden schwere Ionen, z.B. ionisiertes Blei oder Gold, mit Energien von 100 GeV pro Nukleon, was insgesamt einer Energie von ca. 39 TeV im Schwerpunktsystem (CMS) entspricht, am Relativistic Heavy Ion Collider (RHIC) in Brookhaven zur Kollision gebracht [Won94]. Am Large Hadron Collider (LHC) werden Energien von bis zu 5,5 TeV im CMS für Proton-Proton Kollisionen, was für Blei-Blei Kollisionen einer Energie von 1150 TeV entspricht, erreicht. Vor der Kollision bewegen sich zwei Kerne im CMS aufeinander zu. Nach der Kollision bewegen sich die Bereiche baryonischer Materie voneinander weg, im Zentrum der Kollision verbleibt heiße Materie von geringerer Baryondichte. Forscher haben die Hoffnung, auf eine Form von Materie zu stoßen, die nach den Theorien der Elementarteilchenphysik, genauer der Quantenchromodynamik, bei extrem hohen Drücken und/oder hohen Temperaturen entstehen könnte: das Quark-Gluon Plasma. In diesem Zustand wären die Nukleonen in ihre einzelnen Bestandteile, Quarks und Gluonen, aufgelöst. Ein solcher Zustand könnte im Zentrum von Neutronensternen auftreten und hat nach dem Standardmodell der Kosmologie in den ersten $10^{-6} - 10^{-5}s$ nach dem Urknall im Universum vorgeherrscht [LeB00].

1.2 Quantenchromodynamik

Quarks und Gluonen unterliegen der starken Wechselwirkung, welche eine der vier grundlegenden Wechselwirkungen ist. Die Theorie hinter der starken Kraft ist dabei die Quantenchromodynamik (QCD). In dieser Theorie sind die Gluonen die Überträger der Kraft, die zwischen den Quarks wirkt, so wie beispielsweise die Photonen in der Quantenelektrodynamik (QED) die Überträger der elektromagnetischen Kraft zwischen geladenen Teilchen sind. Genau wie die Teilchen, die der elektromagnetischen Kraft unterliegen, eine Ladung haben, ist auch den Teilchen, welche die starke Kraft spüren, eine Quantenzahl zugeordnet: die Farbe. Die Quantenzahl Farbe kann drei verschiedene Werte annehmen, die gewöhnlich mit „rot“, „blau“ und „grün“ bezeichnet werden. Die QCD hat einige Eigenschaften, die sie deutlich von den Theorien der anderen Wechselwirkungen, insbesondere der QED, unterscheidet.

(i) Die Überträger der starken Wechselwirkung, die Gluonen, sind selber „farbgeladen“ und unterliegen auch der starken Kraft.

Dies gilt ebenfalls für die schwache Wechselwirkung: ihre Überträgerteilchen spüren die schwache Kraft und wechselwirken direkt untereinander. Die Photonen dagegen, als Kraftteilchen der QED, haben keine Ladung und wechselwirken dementsprechend auch nicht direkt mit anderen Photonen.

(ii) Für zwei farbgeladene Teilchen gilt, dass die Kraft zwischen ihnen mit steigendem räumlichen Abstand zunimmt.

Auch hier verhält sich beispielsweise die QED genau entgegengesetzt, denn die elektromagnetische Kraft zwischen zwei elektrisch geladenen Teilchen nimmt mit dem Abstand ab. Die Tatsache, dass man somit stark wechselwirkende Teilchen nicht voneinander trennen kann, wird mit dem Begriff confinement bezeichnet:

(iii) Mehrere Quarks schließen sich so zu Teilchen zusammen, dass das dabei entstehende Hadron keine Farbe besitzt.

In der Natur werden keine farbgeladenen Teilchen beobachtet, negativ oder positiv geladene Teilchen dagegen schon[1]. Beispielsweise können zwei farbgeladene Teilchen, ein Quark und ein Anti-Quark, ein farbneutrales Meson bilden:

$$\text{Farbe} + \text{Antifarbe} = \text{Neutral.}$$

Es können auch drei Quarks zusammen ein Baryon bilden, z.B.:

$$\text{Rot}+\text{Grün}+\text{Blau}=\text{Neutral.}$$

Zu den Baryonen gehören unter anderem Protonen und Neutronen, wobei es bei der Unterscheidung verschiedener Mesonen und Baryonen auf eine weitere Quantenzahl ankommt, den Flavour bzw. „Geschmack“[2]. Durch den Flavour werden sechs Quarks unterschieden,

[1] Tatsächlich sind die Quarks selber auch elektrisch geladen, denn das aus Quarks bestehende Proton z.B. hat eine Ladung.

[2] Im Gegensatz zur Farbe ist hier der deutsche Begriff eher unüblich.

Up	Down
Strange	Charm
Bottom	Top,

die teilweise stark unterschiedliche Massen besitzen. Die letzten beiden Punkte sind eng miteinander verbunden: In der Natur wurden nie einzelne Teilchen mit der Eigenschaft „Farbe“ gemessen. In der Theorie äußert sich das durch die Zunahme der Kraft zwischen zwei farbgeladenen Teilchen bei Vergrößerung des Abstandes.
Wieso aber wird nach einem Quark-Gluon Plasma gesucht, wenn die Quarks ihre hadronische Form sowieso nicht aufgeben können? In allen renormierbaren Quantenfeldtheorien, im Standardmodell der Elementarteilchenphysik sind dies die QED, die QCD und die Theorie der schwachen Kraft, hängt die jeweilige Kopplungskonstante von der Temperatur ab. Die Kopplungskonstante ist ein Maß für die Stärke der jeweiligen Wechselwirkung zwischen den Teilchen. In der QED wird die Kopplung mit zunehmender Temperatur sehr langsam stärker. In der Theorie der schwachen Wechselwirkung ist die Kopplung bei verschwindender Temperatur stärker als in der QED, sie nimmt jedoch bei steigender Temperatur ab. In der QCD ist die Kopplungskonstante bei $T = 0$ noch größer als in der Theorie der schwachen Wechselwirkung, nimmt aber noch stärker bei wachsendem T ab. Genauer gesagt gilt für die Kopplungskonstante der QCD ein Gesetz der Form

$$g_{stark}(T) \sim \frac{1}{ln(T)}.$$

Diese Gleichung stammt aus [LeB00]. Bei Anstieg der Temperatur gegen Unendlich strebt die Stärke der Kopplung gegen null. Dieses Phänomen wird als Asymptotische Freiheit bezeichnet: theoretisch besteht die Möglichkeit, durch hohe Temperaturen die „Stärke“ der starken Kraft so weit zu senken, dass farbgeladene Teilchen einzeln vorkommen können. In diesem Zustand wird auch der Begriff deconfinement verwendet, wenn die (freie) Bewegung bzw. die Existenz der Quarks auch außerhalb von Hadronen gemeint ist.

Die Untersuchung der QCD ist rein analytisch nicht durchzuführen, weil die Theorie an sich komplizierter ist als z.B. die QED, wie weiter oben in drei Punkten angedeutet wird. Die Asymptotische Freiheit erlaubt bei hohen Temperaturen den Zugang über die Störungsrechnung, da die Kopplungsstärke dann als kleine Störung behandelt werden kann. Dies wird unmöglich bei niedrigeren Temperaturen, wenn die Kopplung der

Teilchen keine bloße Störung mehr ist, sondern das Verhalten des betrachteten Systems davon entscheidend mitbestimmt wird. In diesem Falle wird mit den Methoden der Gittereichtheorie gerechnet, in denen die Raumzeit diskretisiert wird und die gesamte Dynamik sich so auf bestimmte Wege und Stellen auf dem Gitter beschränkt. In dieser Formulierung der QCD muss enorm viel Rechenaufwand betrieben werden, um die Ergebnisse von Berechnungen auf verschieden groben Gittern schließlich auf den Fall einer kontinuierlichen Raumzeit zu extrapolieren. Es wurden Anfang der 80er Jahre mithilfe der Gittereichtheorie bereits in einem für den störungstheoretischen Zugang zu niedrigen Temperaturbereich ($T \approx 150 MeV$) Hinweise auf einen Phasenübergang von hadronischer Materie zu einem Quark-Gluon Plasma gefunden, wie beispielsweise in [Won94] und [LeB00] nachzulesen ist.

2 Aufgabe und nötige Herleitungen

2.1 Das Ziel der Arbeit

In dieser Arbeit wird das Großkanonische Potential eines Gases aus Fermionen[3] als Funktion von komplexem Chemischen Potential berechnet und diskutiert. Auf die Bedeutung nicht reeller Chemischer Potentiale in der Gittereichtheorie wird später eingegangen. Das Großkanonische Potential ist eine zentrale Größe, da hieraus die thermodynamischen Zustandsvariablen Druck p, Teilchenzahl N bzw. Teilchendichte n, Entropie S bzw. Entropiedichte s und Energie E bzw. Energiedichte e berechnet werden können. Es werden einige Annahmen über dieses Gas gemacht, die die Rechnung vereinfachen sollen.

(i) Das Gas ist masselos, d.h. die einzelnen Teilchen haben keine Masse.

Dies erleichtert die Rechnung wesentlich, ist dabei aber noch eine akzeptable Näherung für die Quarks Up und Down, da ihre Masse (zwischen 1.5 und 6 MeV)[4] im Vergleich zu typischen Hadronenmassen, das Proton beispielsweise hat eine Masse von $m \approx 1GeV$, gering ist.

(ii) Es soll sich dabei um ein freies Gas handeln, d.h. die einzelnen Fermionen wechselwirken nicht miteinander.

Auch dieser Punkt ist berechtigt, denn wie oben beschrieben wird die Kopplungskonstante g_{stark} der starken Kraft bei steigender Temperatur kleiner, die Teilchen wechselwirken also ab genügend großem T nur noch vernachlässigbar über die starke Kraft. Da Quarks jedoch auch ladungsbehaftet sind, wechselwirken sie auch elektromagnetisch miteinander. Die Kopplung in der QED ist allerdings auch bei hohen Temperaturen im Bereich von $T \approx 100GeV$ noch so schwach, dass sie nicht berücksichtigt werden muss. Um dennoch ein thermisches Gleichgewicht in dem betrachteten Gas zu erhalten, kann man sich die Teilchen bis zum Erreichen des Gleichgewichts als wechselwirkend denken, danach wird jegliche Wechselwirkung ausgeschaltet.

(iii) Es gibt nur einen Flavour und eine Farbe, für mehr Freiheitsgrade würde die

[3] Fermionen sind Teilchen mit halbzahligem Spin, dies trifft auch auf Quarks zu.

[4] C. Amsler et al. (Particle Data Group), Physics Letters B667, 1 (2008) and 2009 partial update for the 2010 edition / January 15, 2009

Zustandssumme noch mit der Anzahl der möglichen Farben und Flavours multipliziert werden.

2.2 Herleitung des Großkanonischen Potentials

Die Rechnung wird bei fester Temperatur $T = \frac{1}{\beta}$ durchgeführt, sie wird also „von außen“ vorgegeben. Für die Teilchenzahl gilt, dass Teilchen und Antiteilchen als Paare entstehen und sich gegenseitig vernichten können. Diese Prozesse sind bestimmt durch das Chemische Potential μ, welches die Rate von Teilchenentstehung und -vernichtung angibt. Das Großkanonische Potential wird rein quantenmechanisch mittels statistischer Mechanik hergeleitet. Dafür wird der Großkanonische Formalismus herangezogen. Die einzelnen Teilchen des Gases werden dabei als fermionische, quantenmechanische Harmonische Oszillatoren modelliert, d.h. es gilt

$$\hat{H} = \omega(\hat{N} - \frac{1}{2})$$

für jedes Teilchen. $\hat{N}$ ist dabei der Anzahloperator, der bei Anwendung die Anzahl der Teilchen im Zustand als Eigenwert zurückgibt, gemäß

$$\hat{N}|n >= n|n > .$$

ω ist die relativistische Energie des Teilchens. Da kein Teilchen eine Masse haben soll, gilt

$$\omega = \sqrt{p^2 + m^2} = |p|.$$

Die Teilchen sollen sich innerhalb eines begrenzten Volumens befinden. Innerhalb dieses Volumens, eines Würfels mit Kantenlängen $L_x = L_y = L_z = L$, muss die Wellenfunktion der Teilchen Randbedingungen erfüllen, damit die Teilchen außerhalb des Würfels keine Aufenthaltswahrscheinlichkeit haben: die Wellenfunktion muss an den Seitenflächen des Würfels verschwinden. Durch diese Einschränkung kommt es zu einer Diskretisierung der möglichen Wellenlängen, welche die Wellenfunktion im Würfel annehmen kann. Als maximaler Wert passt eine halbe Wellenlänge hinein, was für alle Raumrichtungen gilt:

$$\lambda_i = \frac{2L}{m_i}, \quad i = x, y, z.$$

Die m_i nehmen natürliche Werte an, da kleinere Wellenlängen in den Würfel passen. Jedes Tripel, mit $\vec{m}$ bezeichnet, ergibt eine andere Mode. Es gibt also unendlich viele mögliche Moden in dem Würfel, jedoch kann sich in jeder Mode, da es sich um ein Gas aus Fermionen handeln soll, nach dem Pauliprinzip nur ein Teilchen befinden. Weil die Teilchen wechselwirkungsfrei sind, gilt

$$\hat{H}_{gesamt} = \sum_{\vec{m}} \hat{H}_{\vec{m}}.$$

Dasselbe gilt für den Anzahloperator. Der Gesamtzustand des Systems ist gegeben durch

$$|n_{\vec{m}_1}, n_{\vec{m}_2}, n_{\vec{m}_3}, ... >,$$

wobei $n_{\vec{m}_i} = \{0, 1\} \;\; \forall \; i$. Diese Darstellung heisst „Besetzungszahldarstellung“, weil sie angibt, wieviele Teilchen sich in welcher Mode befinden.
Für die Großkanonische Zustandssumme gilt

$$\begin{aligned} Z &= Sp\left[e^{-\beta(\hat{H}_{ges}-\mu\hat{N}_{ges})}\right] = Sp\left[e^{-\beta\sum_{\vec{m}}(\hat{H}_{\vec{m}}-\mu\hat{N}_{\vec{m}})}\right] = Sp\left[\prod_{\vec{m}} e^{\frac{\beta|p_{\vec{m}}|}{2}} e^{-\beta(|p_{\vec{m}}|-\mu)\hat{N}_{\vec{m}}}\right] \\ &= \sum_{n_{\vec{m}_1}}\sum_{n_{\vec{m}_2}} ... < n_{\vec{m}_1}, n_{\vec{m}_2}, ...| \prod_{\vec{m}} e^{\frac{\beta|p_{\vec{m}}|}{2}} e^{-\beta(|p_{\vec{m}}|-\mu)\hat{N}_{\vec{m}}} |n_{\vec{m}_1}, n_{\vec{m}_2}, ... > . \end{aligned}$$

Nach Anwendung der Operatoren und Tauschen von Produkt und Summe ergibt sich

$$Z = \prod_{\vec{m}} \sum_{n_{\vec{m}}=0}^{1} e^{\frac{\beta|p_{\vec{m}}|}{2}} e^{-\beta(|p_{\vec{m}}|-\mu)n_{\vec{m}}} = \prod_{\vec{m}} e^{\frac{\beta|p_{\vec{m}}|}{2}} \left(1 + e^{-\beta(|p_{\vec{m}}|-\mu)}\right) = \prod_{\vec{m}} Z_{\vec{m}},$$

d.h. die gesamte Zustandssumme ist das Produkt der Zustandssummen aller einzelnen Moden. Das Großkanonische Potential ist

$$\Omega = -T \ln Z = -T \sum_{\vec{m}} \ln Z_{\vec{m}} = -T \sum_{m_x}\sum_{m_y}\sum_{m_z} \ln Z_{\vec{m}}.$$

Für große L, formal im Limes $L \to \infty$, können die Summen über die Wellenzahlen durch Integrale ersetzt werden. Für die Wellenlänge gilt die de-Broglie-Relation und die Randbedingung

$$\lambda_i = \frac{2\pi}{p_i} = \frac{2L}{m_i},$$

womit $dm_i = \frac{L}{\pi} dp_i$ das Integrationsmaß ist. Damit ist

$$\begin{aligned} \Omega &= -T\frac{L^3}{\pi^3} \int_0^\infty dp_x \int_0^\infty dp_y \int_0^\infty dp_z \ln Z(|p|) \\ &= -\frac{TV}{(2\pi)^3} \int_{-\infty}^\infty dp_x \int_{-\infty}^\infty dp_y \int_{-\infty}^\infty dp_z \ln Z(|p|). \end{aligned}$$

Weil die Betragsfunktion um jedes p steht, ist $\ln Z$ gerade in p und die Integration kann in allen drei Integralen bei $-\infty$ begonnen werden. Da dann jeweils über die doppelte Länge integriert wird, muss der Ausdruck dreimal halbiert werden. Einsetzen der Zustandssumme der einzelnen Moden ergibt

$$\Omega = -\frac{TV}{(2\pi)^3}\int_{-\infty}^{\infty} dp_x \int_{-\infty}^{\infty} dp_y \int_{-\infty}^{\infty} dp_z \left(\frac{\beta|p|}{2} + \ln\left(1 + e^{-\beta(|p|-\mu)}\right)\right).$$

Für Antiteilchen kehrt sich das Vorzeichen des Chemischen Potentials um, der gesamte Ausdruck mit $\mu \to -\mu$ wird zu Ω addiert. Weil die Teilchen Fermionen sind, kommt noch der Spin, der bisher nicht beachtet wurde, als zusätzlicher Freiheitsgrad mit hinzu. Dieser äußert sich durch einen Faktor 2, denn jedes Teilchen bzw. Antiteilchen kann jetzt Spin $s = \pm\frac{1}{2}$ haben. Analog würden hier auch die Freiheitsgrade Farbe und Flavour multiplikativ beitragen. Insgesamt ergibt sich

$$\begin{aligned}
\Omega &= -\frac{2TV}{(2\pi)^3}\int_{-\infty}^{\infty} dp_x \int_{-\infty}^{\infty} dp_y \int_{-\infty}^{\infty} dp_z \left[\beta|p| + \ln\left(1 + e^{-\beta(|p|-\mu)}\right) + \ln\left(1 + e^{-\beta(|p|+\mu)}\right)\right] \\
&= -\frac{2TV}{(2\pi)^3}\int dp^3 \left[\beta|p| + \ln\left(1 + e^{-\beta(|p|-\mu)}\right) + \ln\left(1 + e^{-\beta(|p|+\mu)}\right)\right].
\end{aligned}$$

Dies ist ein Ergebnis, welches auch mit quantenfeldtheoretischen Methoden in [Kap00] hergeleitet wurde. Es folgt

$$\begin{aligned}
\Omega &= -\frac{2TV}{(2\pi)^3}4\pi\int_0^{\infty} dp\; p^2 \left[\beta p + \ln\left(1 + e^{-\beta(p-\mu)}\right) + \ln\left(1 + e^{-\beta(p+\mu)}\right)\right] \\
&= -\frac{TV}{\pi^2}\int_0^{\infty} dp\; p^2 \left[\beta p + \ln\left(1 + e^{-\beta(p-\mu)}\right) + \ln\left(1 + e^{-\beta(p+\mu)}\right)\right],
\end{aligned}$$

wobei im ersten Schritt das Integral auf Kugelkoordinaten mit Radius p umgeschrieben wurde. Die Winkel wurden direkt ausintegriert und tragen den Faktor 4π bei.
Der erste Term im Integral ist divergent. Er rührt von der Nullpunktsenergie der fermionischen Oszillatoren her. Diese „Ultraviolett"-Divergenz kann vernachlässigt werden, da der Term temperatur- und dichtenunabhängig ist ($T\beta p = p$) und er im Zuge der Renormierung sowieso wegfallen würde.

2.3 Die Bedeutung von nicht reellem Chemischen Potential

In der Gittereichtheorie werden Raum und Zeit diskretisiert, um Dynamiken numerisch simulieren zu können. Die einzelnen „Punkte", an denen die Materieteilchen liegen, werden durch sogenannte Link-Variablen U verbunden, welche den Kraftfeldern entsprechen. In einer Theorie mit Quarks und Gluonen sieht die Zustandssumme z.B. nach [D'E02] wie folgt aus:

$$Z = \int DUD\psi D\bar{\psi} e^{-S_G[U]} e^{-S_F[U,\psi,\bar{\psi}]} = \int DUe^{-S_G[U]} \det M[U].$$

Die „D" im Maß sind Großbuchstaben, weil hier über Spinoren bzw. Link-Variablen integriert wird. S_G und S_F sind die gluonische bzw. fermionische Wirkung. In obigem Schritt wurden die Spinoren ψ und $\bar{\psi}$, die Quark- bzw. Antiquarkfelder darstellen, ausintegriert, danach bleibt die sogenannte Fermionendeterminante $\det M$ in Abhängigkeit vom Chemischen Potential stehen. Ein wichtiges Werkzeug um diese Zustandssumme zu berechnen sind Importance Sampling Monte Carlo Methoden, für welche die Fermionendeterminante reell positiv sein muss [Phi00]. Bei Berechnungen mit endlicher Teilchendichte ist $\det M$ jedoch komplex, was die Benutzung dieser Methoden unmöglich macht, da die Integrationspunkte beim Importance Sampling mit der Integrandenfunktion gewichtet werden. Weil aber auf $\mathbb{C}$ keine Ordnungsrelation besteht, kann mit den Werten der Funktion auch nicht gewichtet werden. Wird ein rein imaginäres Chemisches Potential verwendet ist die Fermionendeterminante wiederum positiv reell, somit ist die Nutzung von Importance Sampling möglich. Um das Ergebnis physikalisch interpretieren zu können, ist eine analytische Fortsetzung hin zum reellen Chemischen Potential nötig [D'E02]. In dieser Arbeit wird, unter den oben angegebenen Voraussetzungen, nicht nur das Großkanonische Potential in Abhängigkeit von imaginärem und reellem Chemischen Potential berechnet, sondern als Verallgemeinerung auch in Abhängigkeit von komplexem Chemischen Potential diskutiert. Dabei hat sich in numerischen Gittersimulationen bei nichtverschwindendem Chemischen Potential gezeigt, dass das Verhalten der Natur für hohe Temperaturen sehr nah an den Grenzfall des wechselwirkungsfreien Gases heranreicht.

3 Die Rechnung

Für das zu berechnende Großkanonische Potential wurde im vorigen Kapitel der Ausdruck

$$\Omega = -\frac{TV}{\pi^2}\int_0^\infty dp\; p^2\left[\ln\left(1+e^{-\beta(p-\mu)}\right)+\ln\left(1+e^{-\beta(p+\mu)}\right)\right]$$

hergeleitet. Das Großkanonische Potential Ω ist im Folgenden auf das Volumen normiert, $\Omega \to \frac{\Omega}{V}$, ist also streng genommen eine Potentialdichte. Um Schreibarbeit zu sparen, wird in der Rechnung größtenteils mit der Funktion

$$\ln\bar{Z} = -\beta\pi^2\Omega$$

gearbeitet. Für die endgültigen Ergebnisse wird am Ende jeder Teilrechnung nach Ω umgestellt.

3.1 Symmetrien des Großkanonischen Potentials

Im Blickpunkt der folgenden Rechnung steht das Verhalten des Großkanonischen Potentials als Funktion von komplexem Chemischen Potential. Das Vorgehen besteht im Wesentlichen aus dem Ausführen der Integrale

$$\ln\bar{Z} = \ln\bar{Z}_+ + \ln\bar{Z}_- = \int_0^\infty dp\; p^2\ln(1+e^{-\beta(p+\mu)}) + \int_0^\infty dp\; p^2\ln(1+e^{-\beta(p-\mu)}),$$

doch bereits ohne große Rechnung können zentrale Punkte über das Verhalten der Funktion herausgefunden werden. Es ist leicht zu sehen, dass

$$\ln\bar{Z}(\mu) = \ln\bar{Z}(-\mu) \tag{1}$$

gilt, der Logarithmus der Zustandssumme also als Funktion des Chemischen Potentials gerade ist. Desweiteren wird, weil μ nur im Exponenten der Exponentialfunktion vorkommt, $\ln\bar{Z}$ periodisch mit Periode 2π im Imaginärteil $\mu_i = \Im(\mu)$ sein, d.h.

$$\ln\bar{Z}(\mu_r,\mu_i) = \ln\bar{Z}\left(\mu_r,\mu_i+\frac{2\pi}{\beta}\right),\;\; \mu_r = \Re(\mu),\;\; \mu_i = \Im(\mu). \tag{2}$$

Diese beiden Tatsachen werden bei Stetigkeitsüberlegungen und der Diskussion der Funktion eine wichtige Rolle spielen.

3.2 Rein reelles Chemisches Potential

Das zu lösende Integral ist

$$\ln \bar{Z} = \ln \bar{Z}_+ + \ln \bar{Z}_- = \int_0^\infty dp\ p^2 \ln(1 + e^{-\beta(p+\mu)}) + \int_0^\infty dp\ p^2 \ln(1 + e^{-\beta(p-\mu)}), \quad \mu \in \mathbb{R}^+$$

ohne Beschränkung der Allgemeinheit. Im Hinblick auf die weitere Rechnung wird direkt die sogenannte Fugazität $z = e^{\beta\mu}$ eingeführt, durch diese Schreibweise werden die Terme übersichtlicher. Der erste Teil lässt sich per partieller Integration (Randterme verschwinden!) direkt als Polylogarithmus, dessen Integralform unter (12) in Kapitel 4 aufgeführt ist, schreiben:

$$\begin{aligned}\ln \bar{Z}_+ &= \int_0^\infty dp\ p^2 \ln(1 + z^{-1}e^{-\beta p}) = \frac{\beta}{3}\int_0^\infty dp \frac{p^3 z^{-1} e^{-\beta p}}{1 + z^{-1}e^{-\beta p}} = \frac{\beta}{3}\int_0^\infty dp \frac{p^3}{ze^{\beta p} + 1} \\ &= -\frac{1}{3\beta^3}\int_0^\infty dp \frac{p^3}{-ze^p - 1} = -\frac{3!}{3\beta^3} Li_4(-\frac{1}{z}),\end{aligned}$$

wobei im zweiten Rechenschritt mit $z^{-1}e^{\beta p}$ erweitert wurde und im vorletzten Schritt die Substitution $p \to \frac{p}{\beta}$ vorgenommen wurde. Der zweite Term lautet nach partieller Integration und Erweiterung mit $z^{-1}e^{\beta p}$

$$\ln \bar{Z}_- = \frac{\beta}{3}\int_0^\infty dp \frac{p^3 z e^{-\beta p}}{1 + ze^{-\beta p}} = \frac{\beta}{3}\int_0^\infty dp\ p^3 \frac{1}{z^{-1}e^{\beta p} + 1}.$$

Dieser Term kann nicht direkt auf die Form (12) gebracht werden, da $|x| \leq 1$ für das Argument x des Polylogarithmus gelten muss, hier aber $|x| = z = e^{\beta\mu} > 1$ gilt. Daher ist die Darstellung als einzelner Polylogarithmus nicht definiert. Die Form des Ausdruckes erinnert jedoch an die Geometrische Reihe (11), wobei darauf zu achten ist, dass diese nur für $|z^{-1}e^{\beta p}| < 1$ entwickelt werden darf, genauer

$$|z^{-1}e^{\beta p}| = |e^{\beta(p-\mu)}| < 1 \iff p - \mu < 0.$$

Deshalb wird der Teil mit $p \in [0, \mu]$ abgespalten und verbleibt in der Form

$$\ln \bar{Z}_- = \frac{\beta}{3}\int_0^\mu dp\ p^3 \frac{1}{z^{-1}e^{\beta p} + 1},$$

wogegen für das Integral mit $p \in (\mu, \infty)$ die Form

$$\ln \bar{Z}_- = \frac{\beta}{3}\int_\mu^\infty dp \frac{p^3 z e^{-\beta p}}{1 + ze^{-\beta p}}$$

verwendet wird. Dafür gilt jetzt

$$|ze^{-\beta p}| = |e^{\beta(\mu - p)}| < 1 \iff \mu - p < 0$$

und es kann auch dieser Teil als Geometrische Reihe entwickelt werden. Der obige Ausdruck wird also zu

$$\ln \bar{Z}_- = \frac{\beta}{3}\int_0^\infty dp \frac{p^3 z e^{-\beta p}}{1 + ze^{-\beta p}} = \frac{\beta}{3}\left(\int_\mu^\infty dp \frac{p^3 z e^{-\beta p}}{1 + ze^{-\beta p}} + \int_0^\mu dp \frac{p^3}{z^{-1}e^{\beta p} + 1}\right),$$

was nach Entwicklung als Geometrische Reihen auf

$$\begin{aligned}
\ln \bar{Z}_- &= \frac{\beta z}{3}\int_\mu^\infty dp\; p^3 e^{-\beta p}\sum_{n=0}^\infty (-)^n z^n e^{-\beta p n} + \frac{\beta}{3}\int_0^\mu dp\; p^3 \sum_{n=0}^\infty (-)^n z^{-n} e^{\beta p n} \\
&= \frac{\beta}{3}\int_\mu^\infty dp\; p^3 \sum_{n=0}^\infty (-)^n z^{n+1} e^{-\beta p(n+1)} + \frac{\beta}{3}\int_0^\mu dp\; p^3 \sum_{n=0}^\infty (-)^n z^{-n} e^{\beta p n}
\end{aligned}$$

führt. Nun kann die Struktur $\sim p^3 e^{\pm\beta p n}$ als dreifache Ableitung nach β geschrieben werden, was direkte Integration ermöglicht. Dazu ist es praktikabel, die Summen ab $n = 1$ starten zu lassen, wobei aus der zweiten Summe einfach das $(n = 0)$-Glied herausgezogen wird.

$$\begin{aligned}
\ln \bar{Z}_- &= -\frac{\beta}{3}\sum_{n=1}^\infty (-)^n \left[z^n \int_\mu^\infty dp\; p^3 e^{-\beta p n} - z^{-n}\int_0^\mu dp\; p^3 e^{\beta p n}\right] + \frac{\beta}{3}\int_0^\mu dp\; p^3 \\
&= \frac{\beta}{3}\sum_{n=1}^\infty (-)^n \left(\frac{z^n}{n^3}\partial_\beta^3 \int_\mu^\infty dp e^{-\beta p n} + \frac{z^{-n}}{n^3}\partial_\beta^3 \int_0^\mu dp e^{\beta p n}\right) + \frac{\beta\mu^4}{12} \\
&= \frac{\beta}{3}\sum_{n=1}^\infty (-)^n \left(\frac{z^n}{n^4}\partial_\beta^3 \frac{z^{-n}}{\beta} + \frac{z^{-n}}{n^4}\partial_\beta^3 \frac{(z^n - 1)}{\beta}\right) + \frac{\beta\mu^4}{12}.
\end{aligned}$$

Jetzt müssen nur noch die Ableitungen berechnet und danach die Grenzwerte der Summen nachgeschlagen werden. Bei den Ableitungen ist es wichtig zu beachten, dass $z = e^{\beta\mu} = z(\beta)$ gilt, also die Kettenregel angewandt werden muss. Es folgt

$$\begin{aligned}
\ln \bar{Z}_- &= \frac{\beta}{3}\sum_{n=1}^\infty (-)^n \frac{1}{n^4}\left[-\frac{(n\mu)^3}{\beta} - 3\frac{(\mu n)^2}{\beta^2} - 6\frac{\mu n}{\beta^3} - \frac{6}{\beta^4} + \frac{(\mu n)^3}{\beta} - 3\frac{(\mu n)^2}{\beta^2} + 6\frac{\mu n}{\beta^3} - \frac{6}{\beta^4}\right. \\
&\quad \left. + \frac{6}{\beta^4}z^{-n}\right] + \frac{\beta\mu^4}{12} \\
&= \sum_{n=1}^\infty (-)^n \left(-2\frac{\mu^2}{\beta}\frac{1}{n^2} - 4\frac{1}{\beta^3}\frac{1}{n^4}\right) + \frac{2}{\beta^3}\sum_{n=1}^\infty (-)^n \frac{1}{n^4} z^{-n} + \frac{\beta\mu^4}{12}.
\end{aligned}$$

Der vorletzte Term entspricht der Reihendarstellung (13) von Polylogarithmen. Es folgt mit (9) und (10)

$$\ln \bar{Z}_- = \frac{\pi^2\mu^2}{6\beta} + \frac{7\pi^4}{180\beta^3} + \frac{\beta\mu^4}{12} + \frac{2}{\beta^3} Li_4(-\frac{1}{z})$$

und insgesamt

$$\ln \bar{Z} = \ln \bar{Z}_+ + \ln \bar{Z}_- = \frac{\pi^2\mu^2}{6\beta} + \frac{7\pi^4}{180\beta^3} + \frac{\beta\mu^4}{12}.$$

Unter Beachtung der physikalischen Vorfaktoren erhält man

$$\begin{aligned} \Omega &= -\frac{1}{\beta}\ln Z = -\frac{1}{\beta}\frac{1}{\pi^2}\ln \bar{Z} = -\frac{1}{\pi^2}\left[\frac{\pi^2\mu^2}{6\beta^2} + \frac{7\pi^4}{180\beta^4} + \frac{\mu^4}{12}\right] \\ &= -\frac{7\pi^2}{180\beta^4}\left[1 + \frac{30}{7}\left(\frac{\mu}{\pi T}\right)^2 + \frac{15}{7}\left(\frac{\mu}{\pi T}\right)^4\right]. \end{aligned}$$

In untenstehender Graphik ist der Verlauf der Kurve von $-\Omega$ gegen $\frac{\beta\mu}{\pi}$ aufgetragen.

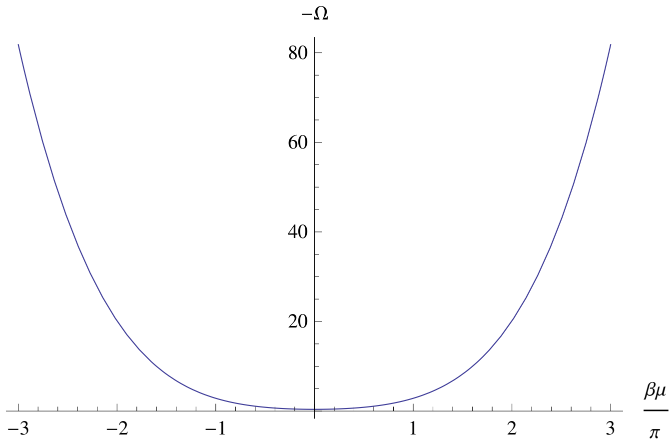

Abbildung 1: Das Großkanonische Potential Ω als Funktion von reellem Chemischen Potential

3.3 Rein imaginäres Chemisches Potential

In diesem Fall gilt

$$\mu = i\mu_i,\ \ \beta\mu_i \in (-\pi, \pi].$$

Aufgrund der angesprochenen Periodizität von $\ln \bar{Z}$ als Funktion von μ_i ist es ausreichend, den Definitionsbereich auf ein Intervall von 2π zu beschränken. Das Intervall ist so gewählt, dass der Schlitz des Logarithmus auf der negativen reellen Halbachse liegt. Funktionswerte mit $\beta\mu_i \notin (-\pi, \pi]$ können dann über die Relation

$$\ln \bar{Z}(\mu_i) = \ln \bar{Z}\left(\mu_i + \frac{2\pi}{\beta}\right)$$

ermittelt werden. Das Ausgangsintegral

$$\begin{aligned} \ln \bar{Z} &= \int_0^\infty dp\; p^2 \ln(1+z^{-1}e^{-\beta p}) + \int_0^\infty dp\; p^2 \ln(1+ze^{-\beta p}) \\ z &= e^{\beta\mu} = e^{i\beta\mu_i} \end{aligned}$$

kann dann durch partielle Integration und Skalierung $p \to \frac{p}{\beta}$ umgeschrieben werden in

$$\ln \bar{Z} = \frac{\beta}{3}\int_0^\infty dp \left[\frac{p^3}{1+ze^{\beta p}} + \frac{p^3}{1+z^{-1}e^{\beta p}}\right] = -\frac{1}{3\beta^3}\int_0^\infty dp \left[\frac{p^3}{-ze^p-1} + \frac{p^3}{-z^{-1}e^p-1}\right],$$

wobei die Randterme verschwinden. Dies ist die Integraldarstellung von Polylogarithmen (12):

$$\ln \bar{Z} = -\frac{2}{\beta^3}\left[Li_4(-\frac{1}{z}) + Li_4(-z)\right],$$

da $|z| = |e^{i\beta\mu_i}| = 1$ für alle μ_i gilt. Für einen solchen Ausdruck wird der „Inverse Zusammenhang“ (14)

$$Li_n(-z) + (-)^n Li_n(-\frac{1}{z}) = -\frac{1}{n!}\ln^n(z) + 2\sum_{r=1}^{[n/2]}\frac{\ln^{n-2r}(z)}{(n-2r)!}Li_{2r}(-1)$$

benutzt, wobei die Summe bis zum größten, ganzzahligen noch in n enthaltenen Wert geht [Lew91]. In diesem Falle liefert die Formel

$$\ln \bar{Z} = -\frac{2}{\beta^3}\left[-\frac{1}{4!}\ln^4(z) + 2\left\{\frac{\ln^2(z)}{2}Li_2(-1) + Li_4(-1)\right\}\right].$$

Die Logarithmen liefern hier eindeutige Werte, da $\beta\mu_i \in (-\pi,\pi]$ eingeschränkt wurde. Die Polylogarithmen mit konstantem Argument -1 sind tabelliert unter (15) sowie (16) und liefern weiter

$$\begin{aligned} \ln \bar{Z} &= -\frac{2}{\beta^3}\left[-\frac{\beta^4\mu_i^4}{24} + \beta^2\mu_i^2\frac{\pi^2}{12} - \frac{7\pi^4}{360}\right] = \frac{\beta\mu_i^4}{12} - \frac{\mu_i^2\pi^2}{6\beta} + \frac{7\pi^4}{180\beta^3} \\ &= \beta\left[\frac{\mu_i^4}{12} - \frac{\mu_i^2\pi^2}{6\beta^2} + \frac{7\pi^4}{180\beta^4}\right], \qquad \beta\mu_i \in (-\pi,\pi]. \end{aligned}$$

Damit erhält man inklusive physikalischer Konstanten

$$\Omega = -\frac{1}{\beta}\frac{1}{\pi^2}\ln \bar{Z} = -\frac{7\pi^2}{180\beta^4}\left[1 - \frac{30}{7}\left(\frac{\mu_i}{\pi T}\right)^2 + \frac{15}{7}\left(\frac{\mu_i}{\pi T}\right)^4\right], \qquad \beta\mu_i \in (-\pi,\pi].$$

Werte der Funktion für $\mu_i \notin (-\pi,\pi]$ können über die Relation (2) erhalten werden. Abschließend wird noch der Fall $\beta\mu_i = \pm\pi$ betrachtet. Hier beginnt die Integration im Verzweigungspunkt des Logarithmus. Es ist ohne Weiteres nicht klar, wie sich die Funktion an dieser Stelle verhält, inbesondere ob sie stetig ist oder ob es Sprünge gibt. Hierzu werden die beiden Relationen über Symmetrie und Periodizität [(1) und (2)] benutzt. Für beliebig kleines aber endliches $\varepsilon \in \mathbb{R}^+$ müssen die Werte der Funktion knapp oberhalb bzw. knapp unterhalb von $\beta\mu_i = \pi$ betrachtet werden.

$$\ln \bar{Z}\left(\frac{\pi+\varepsilon}{\beta}\right) = \ln \bar{Z}\left(\frac{\pi-2\pi+\varepsilon}{\beta}\right) = \ln \bar{Z}\left(\frac{-\pi+\varepsilon}{\beta}\right) = \ln \bar{Z}\left(\frac{\pi-\varepsilon}{\beta}\right)$$

Der erste Schritt benutzt die Periodizität um 2π in $\beta\mu_i$, der zweite Schritt funktioniert, weil die Funktion gerade in μ_i ist. Damit ist schon gezeigt, dass $\ln \bar{Z}(\mu_i)$ stetig im Funktionsargument μ_i ist. Gut zu erkennen ist die stetige Fortsetzung zu Anfang einer neuen Periode bei $\frac{\beta\mu_i}{\pi} = (2n+1),\ n \in \mathbb{Z}$, wo die Funktion $-\Omega$ auch ihre Minima hat.

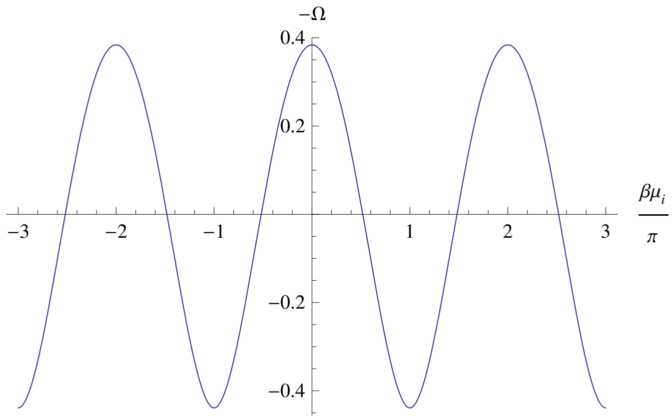

Abbildung 2: Das Großkanonische Potential Ω als Funktion von imaginärem Chemischen Potential

3.4 Komplexes Chemisches Potential

Der zu berechnende Ausdruck ist

$$\begin{aligned}
\ln \bar{Z} &= \int_0^\infty dp\ p^2 \ln(1+e^{-\beta(p+\mu)}) + \int_0^\infty dp\ p^2 \ln(1+e^{-\beta(p-\mu)}),\\
\mu &= \mu_r + i\mu_i,\quad \mu_r \in \mathbb{R}^+,\quad \beta\mu_i \in (-\pi,\pi]\\
z &= e^{\beta\mu} = e^{\beta(\mu_r+i\mu_i)} = e^{\beta\mu_r}e^{i\beta\mu_i} = z_r z_i
\end{aligned}$$

ohne Beschränkung der Allgemeinheit. Dieser kann partiell integriert werden und man erhält

$$\ln \bar{Z} = \frac{\beta}{3}\int_0^\infty dp \frac{p^3}{1+ze^{\beta p}} + \frac{\beta}{3}\int_0^\infty dp \frac{p^3}{1+z^{-1}e^{\beta p}},$$

wobei die Randterme verschwinden. Der erste Term kann per (12) direkt umgeschrieben werden:

$$\ln \bar{Z}_+ = -\frac{2}{\beta^3} Li_4(-z^{-1}).$$

Jedoch ist der zweite Term wieder keine Integraldarstellung eines Polylogarithmus, da für sein Argument $|x| \geq 1$ gilt. Dieser kann analog zum Fall $\mu \in \mathbb{R}$ wieder in zwei Integrale aufgeteilt werden, um die Brüche in Geometrische Reihen umzuwandeln:

$$\begin{aligned}
\ln \bar{Z}_- &= \frac{\beta}{3} \int_0^{\mu_r} dp \frac{p^3}{1+z^{-1}e^{\beta p}} + \frac{\beta}{3} \int_{\mu_r}^{\infty} dp \frac{p^3 z e^{-\beta p}}{1+z e^{-\beta p}} \\
&= \frac{\beta}{3} \sum_{n=0}^{\infty} (-)^n \left[z^{-n} \int_0^{\mu_r} dp\ p^3 e^{\beta p n} + z^{n+1} \int_{\mu_r}^{\infty} dp\ p^3 e^{-\beta p(n+1)} \right].
\end{aligned}$$

An dieser Stelle wird aus der ersten Summe der erste Summand herausgezogen, die letzte Summe einfach bei $n = 1$ gestartet.

$$\begin{aligned}
\ln \bar{Z}_- &= \frac{\beta \mu_r^4}{12} + \frac{\beta}{3} \sum_{n=1}^{\infty} (-)^n \left[z^{-n} \int_0^{\mu_r} dp\ p^3 e^{\beta p n} - z^n \int_{\mu_r}^{\infty} dp\ p^3 e^{-\beta p n} \right] \\
&= \frac{\beta \mu_r^4}{12} + \frac{\beta}{3} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{(-)^n}{n^3} \left[z^{-n} \partial_\beta^3 \int_0^{\mu_r} dp e^{\beta p n} + z^n \partial_\beta^3 \int_{\mu_r}^{\infty} dp e^{-\beta p n} \right],
\end{aligned}$$

wobei Terme $\sim p^3 e^{\pm \beta p}$ wieder als Ableitungen geschrieben wurden. Auswerten der Integrale und anschließendes ableiten führen auf

$$\begin{aligned}
\ln \bar{Z}_- &= \frac{\beta}{3} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{(-)^n}{n^4} z^{-n} \left[-6 \frac{1}{\beta^4} z_r^n + 6 \frac{\mu_r n}{\beta^3} z_r^n - 3 \frac{\mu_r^2 n^2}{\beta^2} z_r^n + \frac{\mu_r^3 n^3}{\beta} z_r^n + \frac{6}{\beta^4} \right] + \frac{\beta \mu_r^4}{12} \\
&\quad + \frac{\beta}{3} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{(-)^n}{n^4} z^n \left[-6 \frac{z_r^{-n}}{\beta^4} - 6 \frac{\mu_r n}{\beta^3} z_r^{-n} + -3 \frac{\mu_r^2 n^2}{\beta^2} z_r^{-n} - \frac{\mu_r^3 n^3}{\beta} z_r^{-n} \right].
\end{aligned}$$

Ausmultiplizieren der Klammer bringt die Terme auf die Reihenform des Polylogarithmus (13):

$$\begin{aligned}
\ln \bar{Z}_- &= -\frac{2}{\beta^3} \left[Li_4(-\frac{1}{z_i}) + Li_4(-z_i) \right] + \frac{2\mu_r}{\beta^2} \left[Li_3(-\frac{1}{z_i}) - Li_3(-z_i) \right] \\
&\quad - \frac{\mu_r^2}{\beta} \left[Li_2(-\frac{1}{z_i}) + Li_2(-e^{i\beta\mu_i}) \right] + \frac{1}{3} \left[Li_1(-\frac{1}{z_i}) - Li_1(-z_i) \right] \\
&\quad + \frac{2}{\beta^3} Li_4(-\frac{1}{z}) + \frac{\beta \mu_r^4}{12}.
\end{aligned}$$

Der vorletzte Term ist genau $-\ln Z_+$. Er fällt also weg und die anderen Terme können wieder mit den Relationen für die Polylogarithmen vereinfacht werden:

$$\begin{aligned}
\ln \bar{Z} \;=\; & -\frac{2}{\beta^3}\left[-\frac{1}{4!}\ln^4(z_i^{-1}) + 2\left(\frac{\ln^2(z_i^{-1})}{2!}Li_2(-1) + \frac{\ln^0(z_i^{-1})}{0!}Li_4(-1)\right)\right] \\
& +\frac{2\mu_r}{\beta^2}\left[-\frac{1}{3!}\ln^3(z_i^{-1}) + 2\frac{\ln^1(z_i^{-1})}{1!}Li_2(-1)\right] \\
& -\frac{\mu_r^2}{\beta}\left[-\frac{1}{2!}\ln^2(z_i^{-1}) + 2\frac{\ln^0(z_i^{-1})}{0!}Li_2(-1)\right] \\
& +\frac{\mu_r^3}{3}\left[-\frac{1}{1!}\ln^1(z_i^{-1})\right] + \frac{\beta\mu_r^4}{12}.
\end{aligned}$$

Die $Li_n(-1)$ sind in Kapitel 4 unter (15) und (16) angegeben. Nach Vereinfachung der Terme ist das Ergebnis

$$\ln \bar{Z} = \beta\left[\frac{\mu_r^4+\mu_i^4}{12} + i\frac{\mu_r^3\mu_i - \mu_r\mu_i^3}{3} - \frac{\mu_r^2\mu_i^2}{2} + \frac{\pi^2(\mu_r^2-\mu_i^2)}{6\beta^2} + i\frac{\pi^2\mu_r\mu_i}{3\beta^2} + \frac{7\pi^4}{180\beta^4}\right].$$

Nun ist noch der Vorfaktor $-\beta\pi^2$ zu beachten, der noch in Ω enthalten ist:

$$\begin{aligned}
\Omega &= -\frac{1}{\beta}\frac{1}{\pi^2}\ln\bar{Z} \\
&= -\frac{1}{\pi^2}\left[\frac{\mu_r^4 + 4i\mu_r^3\mu_i - 6\mu_r^2\mu_i^2 - 4i\mu_r\mu_i^3 + \mu_i^4}{12} + \frac{\pi^2(\mu_r^2 + 2i\mu_r\mu_i - \mu_i^2)}{6\beta^2} + \frac{7\pi^4}{180\beta^4}\right] \\
&= -\frac{1}{\pi^2}\left[\frac{(\mu_r+i\mu_i)^4}{12} + \frac{(\mu_r+i\mu_i)^2\pi^2}{6\beta^2} + \frac{7\pi^4}{180\beta^4}\right] \\
&= -\frac{7\pi^2}{180\beta^4}\left[1 + \frac{30}{7}\left(\frac{\mu_r+i\mu_i}{\pi T}\right)^2 + \frac{15}{7}\left(\frac{\mu_r+i\mu_i}{\pi T}\right)^4\right], \quad \beta\mu_i \in (-\pi,\pi].
\end{aligned}$$

Das Ergebnis hat dieselbe Form wie das Ergebnis aus der Rechnung mit rein reellem bzw. imaginärem μ. Diese Funktion ist allerdings komplexwertig, im Gegensatz zum rein imaginärem Fall. Dort kommt μ nur in geraden Potenzen vor, sodass kein Imaginärteil in der Funktion stehen bleibt und der Term zur zweiten Potenz lediglich sein Vorzeichen wechselt. Außerdem ist die komplexwertige Funktion nicht mehr stetig, wie in folgendem Abschnitt diskutiert wird.

An der Stelle $\mu_i = \frac{\pi}{\beta}$ wird für $p < \mu_r$ am Schlitz des Logarithmus entlang integriert, d.h. Ω muss als Funktion von μ_i nicht stetig sein: an dieser Stelle ist ein Sprung zu erwarten. Um dies zu überprüfen wird eine Differenz aus zwei Wegen, jeweils mit kleinem aber endlichem Abstand ε über bzw. unter dem Schlitz verlaufend, gebildet.

$$\begin{aligned}\Omega\left(\mu_r, \frac{\pi+\varepsilon}{\beta}\right) - \Omega\left(\mu_r, \frac{\pi-\varepsilon}{\beta}\right) &= \Omega\left(\mu_r, \frac{-\pi+\varepsilon}{\beta}\right) - \Omega\left(\mu_r, \frac{\pi-\varepsilon}{\beta}\right) \\ &= \Omega(\mu_r, \mu_{0i}) - \Omega(\mu_r, -\mu_{0i}),\end{aligned}$$

wobei $\mu_{0i} = \frac{\varepsilon-\pi}{\beta}$ gesetzt und die Periodizität in der Abhängigkeit vom Imaginärteil von μ benutzt wurde.

$$\begin{aligned}\Omega(\mu_r, \mu_{0i}) - \Omega(\mu_r, -\mu_{0i}) &= -\frac{7\pi^2}{180\beta^4}\left[\frac{30}{7}\left(\frac{(\mu_r + i\mu_{0i})}{\pi T}\right)^2 + \frac{15}{7}\left(\frac{(\mu_r + i\mu_{0i})}{\pi T}\right)^4\right. \\ &\left. -\frac{30}{7}\left(\frac{(\mu_r - i\mu_{0i})}{\pi T}\right)^2 - \frac{15}{7}\left(\frac{(\mu_r - i\mu_{0i})}{\pi T}\right)^4\right],\end{aligned}$$

was nach Ausmultiplizieren der Potenzen und einsetzen von $\mu_{0i} = \frac{\varepsilon-\pi}{\beta}$

$$\begin{aligned}\Omega(\mu_r, \mu_{0i}) - \Omega(\mu_r, -\mu_{0i}) &= \frac{2i\mu_r\mu_{0i}}{3\beta^2\pi^2}\left[\pi^2 + \beta^2(\mu_r^2 - \mu_{0i}^2)\right] \\ &= \frac{2i\mu_r}{3\beta^3\pi^2}\left[\varepsilon^3 - 3\varepsilon^2\pi + 2\varepsilon\pi^2 - \varepsilon\beta^2\mu_r^2 + \beta^2\mu_r^2\pi\right]\end{aligned}$$

ergibt. Im Limes $\varepsilon \to 0$ wird dies zu

$$\Omega(\mu_r, \mu_{0i}) - \Omega(\mu_r, -\mu_{0i}) = i\frac{2\mu_r^3}{3\beta\pi}.$$

Das Großkanonische Potential Ω ist also an den Stellen $\mu_i = \frac{2n+1}{\beta}$, $n \in \mathbb{Z}$ unstetig und springt um diesen Wert zum Anfangswert der Periode zurück. Dass die Differenz von der Koordinate μ_r abhängt, ist auf anderem Wege leichter zu erkennen. Im Term

$$\ln \bar{Z}_+ = \int_0^\infty dp\ p^2 \ln\left(1 + e^{-\beta(p+\mu_r+i\frac{\pi}{\beta})}\right)$$

beginnt die Integration hinter dem Verzweigungspunkt des Logarithmus, sodass der gesamte Integrationsweg in analytischem Gebiet liegt. Im Term

$$\ln \bar{Z}_- = \int_0^\infty dp\ p^2 \ln\left(1 + e^{-\beta(p-\mu_r-i\frac{\pi}{\beta})}\right)$$

dagegen gilt

$$e^{-\beta(p-\mu_r-i\frac{\pi}{\beta})} = e^{\beta(\mu_r-p)}e^{i\pi} = -e^{\beta(\mu_r-p)},$$

d.h. für $p \in [0, \mu_r]$ ist $1 - e^{-\beta(p-\mu_r)} < 0$, der Integrationsweg liegt für diese p also entlang des Schlitzes vom Logarithmus. In der Abbildung sind beide Wege entlang des Schlitzes und der Integrationsweg im analytischen Gebiet eingezeichnet.

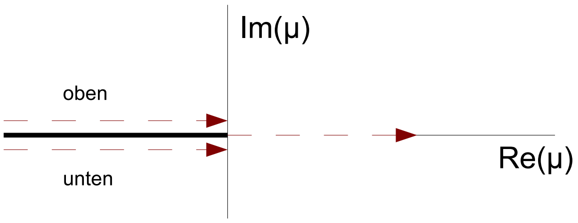

Abbildung 3: Die komplexe Ebene als Funktion von $z = 1 + e^{-\beta(p-\mu)}$

Damit ist die Abhängigkeit von μ_r direkt ersichtlich. Hier muss eine Betrachtung für Argumente $\arg(1 + e^{-\beta(p-\mu)}) = \pm\pi$ erfolgen:

$$\begin{aligned}
\ln \bar{Z}_- &= \int_0^{\mu_r} dp\, p^2 \left[\ln(1 + ze^{-\beta p}) \pm i\pi\right] + \int_{\mu_r}^{\infty} dp\, p^2 \ln(1 + ze^{-\beta p}) \\
&= \int_0^{\infty} dp\, p^2 \ln(1 + ze^{-\beta p}) \pm i\frac{\pi\mu_r^3}{3}.
\end{aligned}$$

Für den Sprung ergibt sich damit

$$\delta\Omega = \frac{1}{\beta\pi^2} i \frac{2\pi\mu_r^3}{3} = i\frac{2\mu_r^3}{3\beta\pi}.$$

Alle folgenden Graphen stellen $-\Omega$ dar, weil Ω bereits auf V normiert ist und für den Druck in einem homogenen System $P = -\frac{\Omega}{V}$ gilt. Daher sind diese Graphen bereits der Druck als Funktion von μ. Der Graph des Realteiles spiegelt den erwarteten Verlauf wieder: Periodizität in Richtung von μ_i und das Parabelverhalten in Richtung von μ_r.

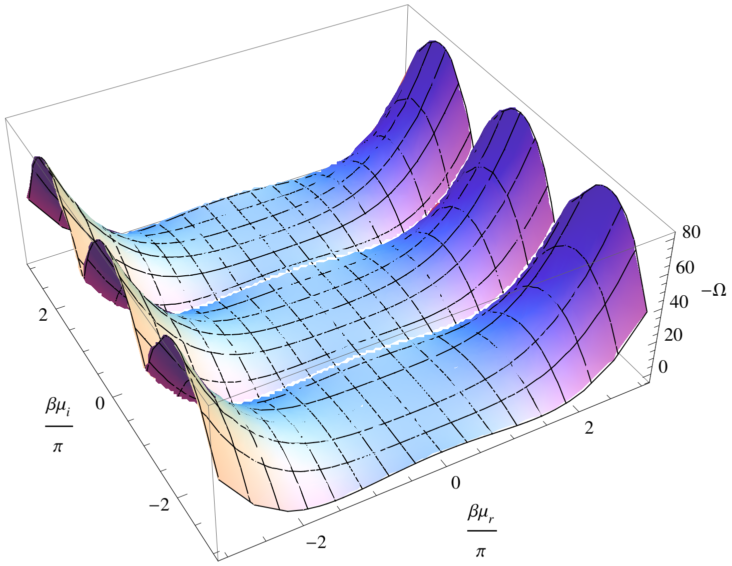

Abbildung 4: Der Realteil von Ω als Funktion von komplexem Chemischen Potential

Um die Extrema der Funktion zu bestimmen, wird $\frac{\beta\mu_r}{\pi} = x$ und $\frac{\beta\mu_i}{\pi} = y$ substituiert, um die Lesbarkeit zu verbessen und den Schreibaufwand gering zu halten. Der Realteil der Funktion lautet

$$\Re(-\Omega) = \frac{7\pi^2}{180\beta^4}\left[1 + \frac{30}{7}(x^2 - y^2) + \frac{15}{7}(x^4 - 6x^2y^2 + y^4)\right], \quad y \in (-1, 1].$$

Für die ersten Ableitungen gilt

$$\partial_x \Re(-\Omega) = \frac{\pi^2}{3\beta^4} x(1 + x^2 - 3y^2) = 0 \tag{3}$$

$$\partial_y \Re(-\Omega) = \frac{\pi^2}{3\beta^4} y(-1 + y^2 - 3x^2) = 0. \tag{4}$$

Hiermit bleiben noch drei Fälle zu untersuchen.

(i) x=0, y=0

An dieser Stelle gilt für die ersten Ableitungen

$$\partial_x \Re(-\Omega) = 0, \quad \partial_y \Re(-\Omega) = 0.$$

Die Hesse-Matrix an dieser Stelle ist

$$H = \frac{\pi^2}{3\beta^4}\begin{pmatrix} 1 + 3x^2 - 3y^2 & -6xy \\ -6xy & -1 - 3x^2 + 3y^2 \end{pmatrix} = \frac{\pi^2}{3\beta^4}\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

und somit indefinit, da beide Eigenwerte der Matrix verschiedene Vorzeichen haben. Dieser Punkt ist ein Sattelpunkt, wie sowohl an dem Graphen als auch an der Funktion selber zu sehen ist: wird $x = 0$ festgehalten, so entspricht die Funktion derjenigen aus dem Fall von rein imaginärem Chemischen Potential, für welche der Punkt $y = 0$ ein Maximum ist. Wird dagegen $y = 0$ festgehalten, so entspricht dies dem Fall von rein reellem Chemischen Potential, für den der Punkt $x = 0$ ein Minimum ist.

(ii) x=0, y≠0

Dann folgt

$$\partial_x \Re(-\Omega) = 0, \quad \partial_y \Re(-\Omega) = \frac{\pi^2}{3\beta^4} y(y^2-1) = 0 \iff y = \pm 1.$$

Für die Hesse-Matrix gilt hier

$$H = \begin{pmatrix} -2 & 0 \\ 0 & 2 \end{pmatrix},$$

sodass diese also wieder indefinit ist. Wegen

$$\partial_x \Re(-\Omega)(\pm\varepsilon, 1) = \frac{\pi^2}{3\beta^4} \pm \varepsilon[(\pm\varepsilon)^2 - 2] = \frac{\pi^2}{3\beta^4} \pm \varepsilon[\varepsilon^2 - 2]$$

liegt bei festgehaltetem y ein Maximum in x vor, bei festgehaltenem x liegt wegen

$$\begin{aligned}
\partial_y \Re(-\Omega)(0, 1-\varepsilon) &= \frac{\pi^2}{3\beta^4}(1-\varepsilon)[-1 + (1-\varepsilon)^2] < 0 \\
\partial_y \Re(-\Omega)(0, 1+\varepsilon) &= \partial_y \Re(-\Omega)(0, -1+\varepsilon) = \frac{\pi^2}{3\beta^4}(-1+\varepsilon)[-1 + (-1+\varepsilon)^2] \\
&= -\partial_y \Re(-\Omega)(0, 1-\varepsilon) > 0
\end{aligned}$$

ein Minimum in y vor. Insgesamt ist dieser Punkt also ein Sattelpunkt.
Auf der Linie $y = 1$ ist die Funktion zwar in x stetig, allerdings ist sie wegen der Forderung nach Periodizität in y nur in $x = 0$ differenzierbar, was man wie folgt sieht:

$$\begin{aligned}
\partial_y \Re(-\Omega)(x, -1+\varepsilon) &= -\partial_y \Re(-\Omega)(x, 1-\varepsilon) && (5) \\
&\to -\frac{\pi^2}{3\beta^4} 3x^2 \neq 0 \ \ \forall\, x \neq 0 && (6)
\end{aligned}$$

im Limes $\varepsilon \to 0$. Damit ist für $y = 1 + 2n, \ \ n \in \mathbb{Z}$ Differenzierbarkeit nur bei $x = 0$ gegeben. In einem Schnittbild mit festem $x = \frac{\beta\mu_r}{\pi}$ sind die nicht differenzierbaren Stellen deutlich zu erkennen:

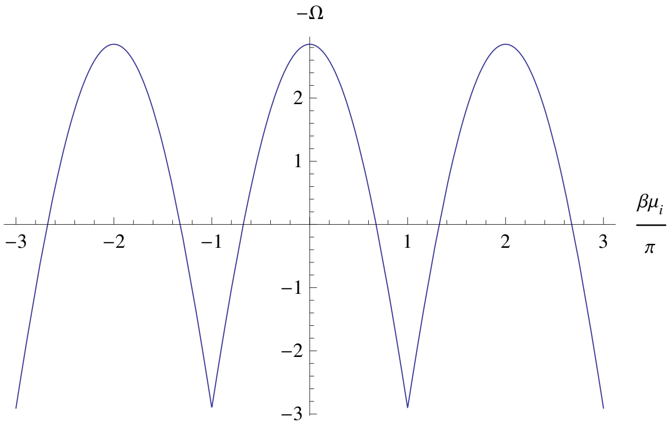

Abbildung 5: Der Realteil von Ω bei festem $x = \frac{\beta\mu_r}{\pi}=1$

(iii) x≠0, y≠ 0

Aus (4) folgt

$$y^2 - 1 - 3x^2 = 0 \iff y^2 = 3x^2 + 1,$$

was eingesetzt in (3)

$$-2 - 8x^2 = 0$$

liefert und $x \in \mathbb{R}$ widerspricht. Für $x \neq 0$ sollte es also keine Extrema geben. In Abb. 4 sind jedoch bei $x \approx \pm 1,5, \quad y = 1$ und periodisch für $y = 1 + 2n, n \in \mathbb{Z}$ Minima zu erkennen. Weil der Graph aus periodischen Teilausdrücken zusammengesetzt ist, deren imaginäres Argument für $y \notin (-1, 1]$ zunächst per (2) in einen Wert $y \in (-1, 1]$ umgerechnet werden muss, entstehen die nicht differenzierbaren Streifen bei $y = 1 + 2n$. Dass für den Fall $x \neq 0$ keine Extrema unter Zuhilfenahme beider partieller Ableitungen zu finden sind liegt also daran, dass der nicht periodische Term

$$\Re(-\Omega) = \frac{7\pi^2}{180\beta^4}\left[1 + \frac{30}{7}(x^2 - y^2) + \frac{15}{7}(x^4 - 6x^2y^2 + y^4)\right], \quad y \in \mathbb{R}$$

überhaupt gar keine Minima an diesen Stellen hat. Sie müssen somit nur durch die Ableitung nach x bei $y = 1$ gesucht werden:

$$\partial_x \Re(-\Omega)(x, 1) = \frac{\pi^2}{3\beta^4} x(x^2 - 2) = 0.$$

Somit befinden sich bei $x = \pm\sqrt{2}$ Tiefpunkte in x bei konstantem y.
Zusammenfassend besitzt die Funktion $\Re(-\Omega)$ also für

$$\mu_i = \frac{(2n + 1)\pi}{\beta}, \quad n \in \mathbb{Z}, \quad \mu_r = \pm\frac{\sqrt{2}\pi}{\beta}$$

Minima, für

$$\mu_r = 0, \quad \mu_i = \frac{2n\pi}{\beta}, \quad n \in \mathbb{Z}$$

Sattelpunkte und für

$$\mu_r = 0, \quad \mu_i = \frac{(2n+1)\pi}{\beta}, \quad n \in \mathbb{Z}$$

weitere Sattelpunkte.

Die Suche nach Extrema beim Imaginärteil ist weitgehend analog zu dem Vorgehen beim Realteil.

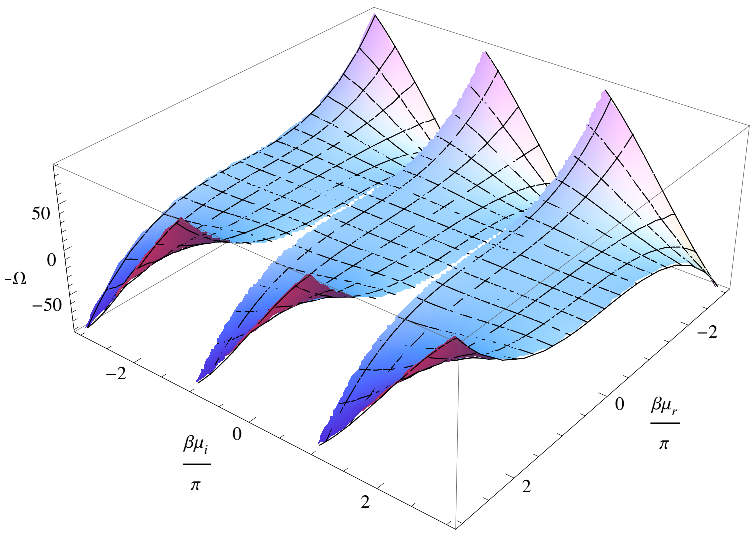

Abbildung 6: Der Imaginärteil von Ω als Funktion von komplexem Chemischen Potential

Es gilt

$$\Im(-\Omega) = \frac{\pi^2}{3\beta^4}(xy + x^3y - xy^3), \quad y \in (-1, 1].$$

woraus

$$\partial_x \Im(-\Omega) = \frac{\pi^2}{3\beta^4} y(1 + 3x^2 - y^2) \tag{7}$$

$$\partial_y \Im(-\Omega) = \frac{\pi^2}{3\beta^4} x(1 + x^2 - 3y^2) \tag{8}$$

folgt. Es werden wieder drei Fälle unterschieden. Im Falle

(i) x=0, y=0

gilt für die partiellen Ableitungen

$$\partial_x \Im(-\Omega) = \partial_y \Im(-\Omega) = 0.$$

Für die Hessematrix gilt an dieser Stelle

$$H = \frac{\pi^2}{3\beta^4} \begin{pmatrix} 6xy & 1+3x^2-3y^2 \\ 1+3x^2-3y^2 & -6xy \end{pmatrix} = \frac{\pi^2}{3\beta^4} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$$

Das charakteristische Polynom $\det(H - \lambda id)$ liefert Eigenwerte $\lambda = \pm\frac{\pi^2}{3\beta^4}$, sodass die Hessematrix indefinit ist. In der Umgebung von $x = 0, y = 0$ können Punkte mit

$$\Im(-\Omega)(\varepsilon, -\varepsilon) < \Im(-\Omega)(0,0) = 0 < \Im(-\Omega)(-\varepsilon, -\varepsilon)$$

gefunden werden. Damit ist dieser Punkt ein Sattelpunkt.
Im Falle

(ii) x=0, y≠0

gilt

$$\begin{aligned} \partial_y \Im(-\Omega) &= 0 \\ \partial_x \Im(-\Omega) &= \frac{\pi^2}{3\beta^4} y(1-y^2) = 0 \Rightarrow y = \pm 1 \end{aligned}$$

An der Stelle $y = 1$ ist die Funktion, analog zum Realteil, nur für $x = 0$ differenzierbar und in diesem Falle auch nur dann stetig. Gut zu erkennen ist in Abbildung 6 die Abhängigkeit der Größe der Unstetigkeit von x bzw. μ_r. Zwei Schnittbilder für feste $x = \frac{\beta\mu_r}{\pi}$ verdeutlichen diese Tatsache:

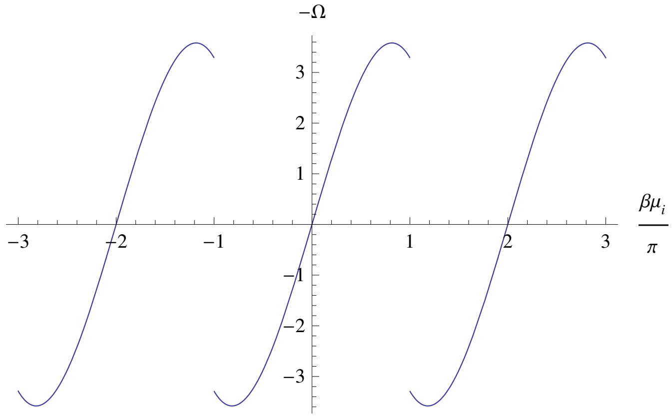

Abbildung 7: Der Imaginärteil von Ω bei festem $x = \frac{\beta\mu_r}{\pi}$=1

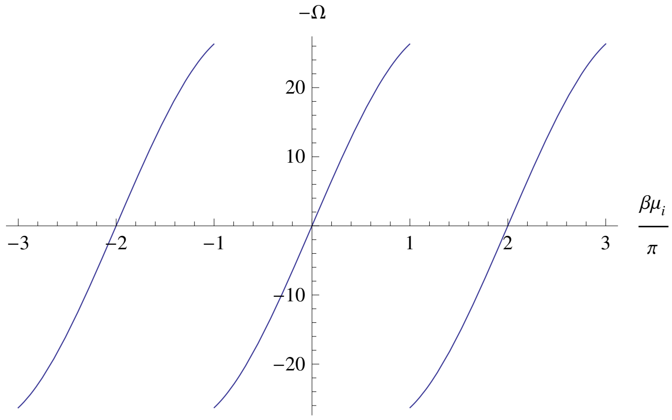

Abbildung 8: Der Imaginärteil von Ω bei festem $x = \frac{\beta\mu_r}{\pi}$=2

Für kleine Werte x, und damit für kleine Unstetigkeiten, liegen Extrema in y innerhalb der Periode vor, wie in Abbildung 7 zu erkennen ist. Bei wachsendem x wird der Sprung in y größer und es kommen keine Extrema in y innerhalb der Periode mehr vor (Abbildung 8).

Im Punkt $x = 0,\ y = 1$ zeigt die Funktion ein sattelpunktartiges Verhalten: die Hessematrix ist

$$H = \frac{\pi^2}{3\beta^4}\begin{pmatrix} 6xy & 1+3x^2-3y^2 \\ 1+3x^2-3y^2 & -6xy \end{pmatrix} = \frac{\pi^2}{3\beta^4}\begin{pmatrix} 0 & -2 \\ -2 & 0 \end{pmatrix},$$

also wieder indefinit. Für $y = 1$ gilt

$$\Im(-\Omega)(-\varepsilon, 1) = -\frac{\pi^2}{3\beta^4}\varepsilon^3 < \Im(-\Omega)(0,1) = 0 < \Im(-\Omega)(\varepsilon, 1) = \frac{\pi^2}{3\beta^4}\varepsilon^3,$$

sodass es um den Punkt $x = 0, y = 1$ herum Argumente mit größerem bzw. kleinerem Funktionswert gibt. In diesem Sinne kann von einem Sattelpunkt gesprochen werden. Im Falle

(iii) x$\neq 0$, y$\neq 0$

kann, genau wie bei der entsprechenden Betrachtung des Realteiles, aus (8)

$$y^2 = 1 + 3x^2$$

gefolgert werden, woraus sich mit (8)

$$1 + x^2 - 3y^2 = 1 + x^2 - 3 - 9x^2 = -2 - 8x^2 = 0$$

ergibt. Dies widerspricht $x \in \mathbb{R}$, weswegen keine weiteren Extrema existieren. Zusammenfassend hat die Funktion also bei

$$\mu_r = 0, \quad \mu_i = \frac{2n\pi}{\beta}, \quad n \in \mathbb{Z}$$

einen Sattelpunkte, sowie bei

$$\mu_r = 0, \quad \mu_i = \frac{(2n+1)\pi}{\beta}$$

im Sinne der oben geführten Diskussion ebenfalls Sattelpunkte.

4 Formeln

Zur Berechnung des Großkanonischen Potentials werden Grenzwerte einiger Summen der Form $\sum_n \frac{1}{n^k}$ und Zusammenhänge zwischen Polylogarithmen benötigt. Diese werden in diesem Kapitel zusammengestellt.

4.1 Summen

$$\sum_{n=1}^{\infty} \frac{(-)^n}{n^2} = -\frac{\pi^2}{12} \tag{9}$$

$$\sum_{n=1}^{\infty} \frac{(-)^n}{n^4} = -\frac{7\pi^4}{720} \tag{10}$$

$$\sum_{n=1}^{\infty} x^n = \frac{1}{1-x}, \qquad |x| < 1 \tag{11}$$

4.2 Polylogarithmen

Es werden in der Rechnung folgende Summen- und Integraldarstellungen des Polylogarithmus verwendet:

$$Li_{n+1}(x) = \frac{1}{\Gamma(n+1)} \int_0^{\infty} dt \frac{t^n}{\frac{e^t}{x} - 1}, \qquad |x| \leq 1 \tag{12}$$

$$Li_n(x) = \sum_{k=1}^{\infty} \frac{x^k}{k^n}, \qquad |x| \leq 1. \tag{13}$$

Außerdem wird der sogenannte „Inverse Zusammenhang“

$$Li_n(-z) + (-)^n Li_n(-\frac{1}{z}) = -\frac{1}{n!} \ln^n(z) + 2 \sum_{r=1}^{[n/2]} \frac{\ln^{n-2r}(z)}{(n-2r)!} Li_{2r}(-1) \tag{14}$$

benutzt, wobei die Summe bis zum größten, ganzzahligen noch in n enthaltenen Wert läuft [Lew91]. Die $Li_{2r}(-1)$ ergeben sich mittels der Summenformeln (9) und (10) zu

$$Li_2(-1) = -\frac{\pi^2}{12} \tag{15}$$

$$Li_4(-1) = -\frac{7\pi^4}{720}. \tag{16}$$

Literatur

[D'E02] M. Lombardo, M. D'Elia, *Finite density QCD via imaginary chemical potential*, arXiv:hep-lat/0209146v2 (2002).

[Kap00] J. I. Kapusta, *Finite temperature field theory*, Cambridge Univ. Press, 2000.

[LeB00] M. LeBellac, *Thermal field theory*, Cambridge Univ. Press, 2000.

[Lew91] L. Lewin, *Mathematical surveys and monographs: Structural properties of polylogarithms*, American Mathematical Society, 1991.

[Phi00] O. Philipsen, *Static correlation lengths in QCD at high temperature and finite density*, arXiv:hep-lat/0011019v2 (2000).

[Won94] C.-Y. Wong, *Introduction to high energy heavy ion collisions*, World Scientific Publ., 1994.