Masterthesis

Phasenraumdynamik von stark wechselwirkenden Bose Systemen

Phasespace dynamics of strongly interacting Bose systems

vorgelegt von

Eduard Seifert

September 2014

Betreuer: Prof. Dr. Dr. Wolfgang Cassing

Institut für Theoretische Physik Fachbereich 07 - Mathematik und Informatik, Physik, Geographie Justus-Liebig-Universität Gießen



Inhaltsverzeichnis

1	Einleitung	1								
2	Theoretische Einführung 2.1 Kadanoff-Baym Gleichungen 2.2 Transport 2.2.1 Nicht-relativistische on-shell Transporttheorie 2.2.2 Relativistische off-shell Transporttheorie 2.2.3 Phasenräume 2.3 Numerische Implementierung	5 15 15 19 22 27								
3	Transportsimulation in 2+1 Dimensionen3.1 Kopplung λ =14 GeV3.2 Kopplung λ =18 GeV3.3 Lösung der Kadanoff-Baym Gleichungen	31 31 40 41								
4	Zusammenfassung	49								
A	A Gradientenentwicklung									
в	B Volumenabhängigkeit der Lösung der Tranportgleichung									
$\mathbf{Li}^{\mathbf{r}}$	teraturverzeichnis	57								

Kapitel 1

Einleitung

In weiten Teilen der Physik sind es Vielteilchensysteme außerhalb des Gleichgewichts, die das Interesse der Forschung bilden. Aus diesem Grund wird sich seit Jahrzehnten darum bemüht die verschiedenen Transportprozesse, wie sie in der Kernphysik, Plasmaphysik, Festkörperphysik oder in Schwerionenkollisionen vorkommen, theoretisch korrekt zu beschreiben. Vor allem die Nichtgleichgewichtsdynamik von sehr schnell ablaufenden Prozessen steht dabei im Mittelpunkt. Den Anfang solcher Nichtgleichgewichts-Beschreibungen machte Boltzmann mit seiner berühmten Transportgleichung [1] Ende des 19. Jahrhunderts, welche die kinetische Äquilibrierung der Phasenraumdichte eines aus klassischen Teilchen bestehenden Gases beschreibt. In der darauf folgenden Zeit wurden mehrere Ansätze zur Herleitung von Transportgleichungen gewählt, welche die quantenmechanischen Eigenschaften der Teilchen berücksichtigt und der speziellen Relativitätstheorie genügen. Eine Reihe von nicht-relativistischen Transportgleichungen basiert auf den reduzierten Dichtematrizen, die über eine Hierarchie an gekoppelten Gleichungen miteinander zusammenhängen, welche unter dem Namen BBGKY-Hierarchie (benannt nach den Autoren Bogolyubov, Born, Green, Kirkwood und Yvon) bekannt ist. Aus der BBGKY-Hierarchie wurden Gleichungen wie die Vlasov Gleichung [2] und die Vlasov-Uehling-Uhlenbeck (VUU) Gleichung [3] erzielt, wobei Uehling und Uhlenbeck keine konkrete Herleitung ihrer Gleichung vollführten (eine Herleitung befindet sich in Ref. [4]). Die Vlasov-Gleichung beinhaltet kein Kollisionsintegral, erlaubt jedoch die Berechnung im selbstkonsistenten Feld der Teilchen und in äußeren Feldern. Die VUU Gleichung besitzt die Struktur der Boltzmann Gleichung mit dem Zusatz, dass hier der Driftterm, der Vlasov Gleichung entsprechend, äußere sowie selbstkonsistente Felder berücksichtigt und das Kollisionsintegral Bose-Enhancement-Faktoren, bzw. Pauli-Blocking-Faktoren beinhaltet, womit die Gleichung der jeweiligen Quantenstatis-

Kapitel 1 EINLEITUNG

tik genügt.

Eine für die relativistischen und quantenfeldtheoretischen Eigenschaften der untersuchten Systeme besser geeignete Beschreibung findet sich in der Verwendung von Greensfunktionen wieder. Greensfunktionen haben den Vorteil, dass sie die Kausalität und andere Erhaltungsgrößen, wie Energie-, Impuls- und Drehimpulserhaltung, nicht verletzen. Martin und Schwinger haben für die Einteilchen-Greensfunktion der imaginären Zeit eine Hierarchie an gekoppelten Gleichungen aufgestellt, welche als Martin-Schwinger Hierarchie [5] bekannt ist. Diese Gleichungen können jedoch nur Systeme im Gleichgewicht beschreiben. Der Grund hierfür ist, dass das Integral über die imaginäre Zeit dem statistischen Mittel über die Gleichgewichts-Dichtematrix entspricht und folglich für Systeme außerhalb des Gleichgewichts nicht anwendbar ist. Für eine Ausweitung des Greensfunktionsformalismus auf Nichtgleichgewichtszustände haben Kadanoff und Baym ausgehend von der Martin-Schwinger Hierarchie Bewegungsgleichungen für Greensfunktionen der realen Zeit durch analytische Fortsetzung von imaginären zu realen Zeiten hergeleitet [6], welche das System sowohl innerhalb als auch außerhalb des Gleichgewichts beschreiben. Diese Bewegungsgleichungen sind später unter dem Namen Kadanoff-Baym (KB) Gleichungen bekannt geworden. Die Selbstenergien, die in den KB Gleichungen vorkommen, müssen zum Erhalt der Symmetrien der Lagrangedichte gewisse Selbstkonsistenzen erfüllen [7]. Zumeist werden die Selbstenergien aus den Zwei-Teilchen-irreduziblen (2PI) Diagrammen der effektiven Wirkung in einer gewissen Ordnung der Kopplungskonstanten, bzw. Anzahl der Loops bestimmt [8]. Alternativ können die Selbstenergien mit der T-Matrix Näherung berechnet werden, siehe hierzu Ref. [9]. Aus der Wignertransformierten der KB Gleichungen können durch Entwicklung einer beliebigen Ordnung des Gradienten der mittleren Raumzeit Transportgleichungen bestimmt werden. Bei Annahme eines räumlich homogenen Systems wird in der Literatur die Gradientenentwicklung in erster Ordnung durchgeführt [10–13]. Die so definierten Transportgleichungen liefern am Beispiel der skalaren ϕ^4 -Theorie in 2+1 Dimensionen zu der KB Theorie fast identische Werte [8]. Weitere Bewegungsgleichungen für die Greensfunktionen der Realzeit eines Vielteilchensystems können wie in Ref. [14] durch Ausnutzung der Heisenbergschen Bewegungsgleichungen hergeleitet werden, welche ebenfalls eine Hierarchie an gekoppelten Gleichungen für die Greensfunktion ergeben. Die so gewonnenen Bewegungsgleichungen werden nach der Cluster-Entwicklung bis in vierter Ordnung der Hierarchie für die skalare ϕ^4 Theorie in verschiedenen räumlichen Dimensionen auf ihre Eigenschaften von Peter et al. [15, 16] untersucht.

Die skalare ϕ^4 -Theorie dient häufig als "Labor" um die Anwendbarkeit eines Ansatzes

zu überprüfen. Das liegt daran, dass die skalare ϕ^4 -Theorie zum Einen die einfachste denkbare wechselwirkende Quantenfeldtheorie ist und zum Anderen wurde sie in der Vergangenheit analytisch sowie ihr Verhalten für verschiedenste Anfangssituationen numerisch, wie durch die Lösung der KB Gleichungen, untersucht, wodurch ihre Eigenschaften unter verschiedensten Gesichtspunkten in hohem Maße verstanden sind. Bisher konnten allerdings kritische Phänomene, wie der Phasenübergang in das Bose-Einstein Kondensat, nicht genauer untersucht werden. All diese Punkte machen die skalare ϕ^4 -Theorie in zwei räumlichen Dimensionen in dieser Arbeit ebenfalls zum Testobjekt der verwendeten Transportgleichung.

In dieser Arbeit wird erstmalig eine relativistische off-shell Transportgleichung auf ein räumlich homogenes Bose-System mit Bose-Enhancement-Faktoren numerisch umgesetzt und angewendet. Als wechselwirkende Theorie dient die skalare ϕ^4 -Theorie in 2+1 Dimensionen. Das Kollisionsintegral der Transportgleichung basiert auf "detailed balance", was sicherstellt dass im Gleichgewicht die Hin- und Rückreaktionen gleichwahrscheinlich sind und das Kollisionsintegral verschwindet, was dem korrekten Grenzfall für $t \to \infty$ entspricht. Zur Lösung der Transportgleichung wird der Testteilchen Ansatz gewählt, welcher für die Implementierung der off-shell Dynamik um eine variable Masse erweitert wird. Als Spektralfunktionen werden Breit-Wigner Funktionen verwendet, welche in erster Ordnung der Gradientenentwicklung aus den KB Gleichungen für die Spektralfunktion erhalten werden, und die Transportgleichung damit die gleichen spektralen Eigenschaften wie die KB Theorie aufweisen sollte. Neben der konsistenten off-shell Formulierung beinhaltet der Transportansatz, anders als beispielsweise die Boltzmann Gleichung, die Teilchenzahl verändernden $1 \leftrightarrow 3$ Reaktionen, weshalb der hier verwendete Transportansatz das Bose-System innerhalb der Born'schen Näherung vollständig beschreibt und ein direkter Vergleich mit der Lösung der KB Gleichungen durchgeführt werden kann.

Zunächst werden die nötigen theoretischen Grundlagen zur Beschreibung eines stark wechselwirkenden Vielteilchensystems außerhalb des Gleichgewichts aufgeführt. In der Feldtheorie sind die relevanten Größen Vakuumerwartungswerte (in dieser Arbeit vor allem die Zwei-Punkt-Korrelationsfunktion/ Einteilchen-Greensfunktion), welche die Propagation eines wechselwirkenden Felds in Raum und Zeit beschreibt. Für die zeitliche Entwicklung eines solchen Vakuumerwartungswerts wird der geschlossene Zeitpfad (CTP) eingeführt, auf dem auch die Einteilchen-Greensfunktionen definiert sind. Nach

Kapitel 1 EINLEITUNG

der Herleitung der Kadanoff-Baym Gleichungen für die skalare ϕ^4 -Theorie aus den Dyson-Schwinger Gleichungen, unter Verwendung der Selbstenergien bis zur zweiten Ordnung der Kopplungskonstanten λ , folgt eine allgemeine Einführung in die nichtrelativistische Transporttheorie. Zum Schluss der theoretischen Einführung wird der relativistische off-shell Fall vorgestellt und die numerische Implementierung des transporttheoretischen Ansatzes zur Simulation skalarer Bosonen in der ϕ^4 -Theorie in 2+1 Dimensionen dargelegt. Im Anschluss wird die Äquilibrierung des skalaren Bose-Systems für vier verschiedene Initialisierungen, welche alle weit ab vom Gleichgewicht liegen, bei den Kopplungskonstanten $\lambda = 14 \text{ GeV}$ und 18 GeV untersucht. Hierauf folgt der Vergleich mit den Lösungen der Kadanoff-Baym Gleichungen und eine Diskussion beider Methoden unter dem Gesichtspunkt der Untersuchung stark wechselwirkender Bose-Systeme.

Kapitel 2

Theoretische Einführung

In diesem Abschnitt werden die für diese Arbeit nötigen theoretischen Grundlagen erarbeitet. Zunächst wird die Keldysh-Kontur, bzw. der geschlossene Zeitpfad (Closed **T**ime **P**ath = CTP), auf dem die Greensfunktionen und Selbstenergien definiert sind, vorgestellt. Nach der Diskussion einiger wichtiger Eigenschaften der auf der Keldysh-Kontur definierten Funktionen werden die Kadanoff-Baym Gleichungen für die skalare ϕ^4 -Theorie in 2+1 Dimensionen aus der Dyson-Schwinger Gleichung hergeleitet. Im Anschluss werden die wichtigsten Grundlagen für die Simulation eines bosonischen Systems dargelegt. Alle Berechnungen erfolgen in den natürlichen Einheiten $\hbar = c = 1$, in zwei räumlichen und einer zeitlichen Dimension und der Vektor x steht für $x = (t, \mathbf{x})$.

2.1 Kadanoff-Baym Gleichungen

Die folgenden Herleitungen gehen vom Heisenberg-Bild aus. Im Heisenberg-Bild besitzen nicht die Zustände die Zeitabhängigkeit, sondern die Operatoren, wodurch die Spurbildung bei der Berechnung von Erwartungswerten über eine zeitlich konstante Dichtematrix erfolgt. Die Zeitentwicklung von einer Zeit t' zur Zeit t eines Zustandes, bzw. eines Operators wird über den Zeitentwicklungsoperator $\hat{U}(t,t')$ durchgeführt. Der unitäre Zeitentwicklungsoperator erfüllt die Operatorgleichung,

$$i\frac{\partial \hat{U}(t,t')}{\partial t} = \hat{H}(t)\hat{U}(t,t') \quad , \qquad (2.1)$$

mit \hat{H} als dem Hamiltonoperator des Systems. Eine formale Lösung für $\hat{U}(t, t')$ (unter Verwendung des Zeitordnungsoperators T, der Feldoperatoren späterer Zeit nach links permutiert) bildet die Dyson-Reihe; sie lässt sich in abkürzender Notation wie folgt

Kapitel 2 | THEORETISCHE EINFÜHRUNG

schreiben:

$$\hat{U}(t,t') = T(\exp[-i\int_{t'}^{t} \mathrm{d}z \; \hat{H}(z)])$$
 (2.2)

Mit der Kenntnis des Zeitentwicklungsoperators gilt für den Erwartungswert eines beliebigen Operators \hat{O} im Heisenberg-Bild und der zeitlich konstanten Dichtematrix $\hat{\rho}$:

$$O(t) = \langle \hat{O}_H(t) \rangle = \operatorname{Tr}\left(\hat{\rho}\,\hat{O}_H(t)\right) = \operatorname{Tr}\left(\hat{\rho}\,\hat{U}(0,t)\hat{O}\,\hat{U}(t,0)\right)$$
(2.3)

Im Folgenden wird davon ausgegangen, dass sich das System zum Zeitpunkt t < 0im thermodynamischen Gleichgewicht befindet, wodurch im Fall eines großkanonischen Ensembles die Dichtematrix für alle Zeiten t < 0 durch

$$\hat{\rho} = \frac{\exp[-\beta(\hat{H} - \mu\hat{N})]}{\operatorname{Tr}(\exp[-\beta(\hat{H} - \mu\hat{N})])}$$
(2.4)

gegeben ist und alle Erwartungswerte von Observablen damit zeitlich konstant sind. Dabei ist zu bemerken, dass der Hamiltonoperator \hat{H} und der Teilchenzahloperator \hat{N} keine explizite Zeitabhängigkeit besitzen. Die Spur im Nenner sorgt für die korrekte Normierung der Dichtematrix. Zum Zeitpunkt t = 0 soll das System von außen gestört werden, wodurch sich die Erwartungswerte zeitlich ändern werden. Die Dichtematrix (2.4) kann zur Vereinfachung des Erwartungswertes durch den Zeitentwicklungsoperator ausgedrückt werden,

$$\hat{\rho} = \frac{\exp[\beta\mu\hat{N}]\hat{U}(-i\beta,0)}{\operatorname{Tr}(\ldots)} \quad , \tag{2.5}$$

mit $t \to -i\beta$. Einsetzen dieser Dichtematrix in (2.3) ergibt

$$O(t) = \langle \hat{O}_H(t) \rangle = \frac{\text{Tr}\{\exp[\beta \mu \hat{N}] \hat{U}(-i\beta, 0) \hat{U}(0, t) \hat{O} \hat{U}(t, 0)\}}{\text{Tr}\{\exp[\beta \mu \hat{N}] \hat{U}(-i\beta, 0)\}} \quad .$$
(2.6)

Die Zeitentwicklung des Operators \hat{O} kann somit als ein bestimmtes Zeit-Konturintegral aufgefasst werden. Die Kontur beginnt bei $t_0 = 0$ und erstreckt sich bis t auf dem chronologischen (+) Ast, kehrt anschließend von t zurück zu $t_0 = 0$ auf dem antichronologischen (-) Ast und verläuft abschließend auf der komplexen Zeitachse nach $-i\beta$. Diese Kontur wird als die **Keldysh-Kontur** bezeichnet. Die Integration entlang der imaginären Zeitachse entspricht der Mittelung über die Gleichgewichts-Dichtematrix. Wird eine beliebige Anfangskonfiguration gewählt, kann das thermodynamische Mittel auf diese Art und Weise nicht genommen werden, stattdessen muss die Mittelung über die Anfangsdichtematrix ausgeführt werden und die Integration über die imaginäre Zeitachse entfällt.

In dieser Arbeit wird von Systemen ausgegangen, die sich zu Beginn der Propagation nicht im Gleichgewicht befinden und die Integration sich somit auf den geschlossenen Zeitpfad (Closed Time Path = CTP) entlang des chronologischen und antichronologischen Asts beschränkt. Eine Veranschaulichung dieses geschlossenen Zeitpfades ist in Abb. 2.1 gegeben. In Ref. [18] werden neben den hier in der Arbeit verwendeten Eigen-



Abb. 2.1 – Die Kontur des verwendeten Zeitpfades. Die Zeit t_1 liegt auf dem chronologischen (+) Ast, die Zeit t_2 auf dem antichronologischen (-) Ast. Die Abbildung ist Ref. [17] entnommen.

schaften weitere wichtige Eigenschaften von Funktionen auf der Keldysh-Kontur aufgeführt und hergeleitet. Für die Anwendung auf dem CTP müssen lediglich die auf der imaginären Zeitachse definierten Funktionsteile identisch Null gesetzt werden.

In der Feldtheorie sind die relevanten Größen Vakuumerwartungswerte von Produkten von Feldoperatoren, die Propagatoren des Systems welche von Greensfunktionen beschrieben werden. In dieser Arbeit ist die zeitliche Entwicklung des Vakuumerwartungswerts von Produkten zweier skalarer, bosonischer Feldoperatoren, der Einteilchen-Greensfunktion von Interesse. Zu diesem Zweick beschreiben die realen Feldoperatoren ϕ bosonische Zustände und der Erwartungswert $\langle \cdot \rangle$ berechnet sich wie in Gleichung (2.3) durch die Spurbildung über die zu Beginn präparierte Dichtematrix $\hat{\rho}$. Dadurch dass die Einteilchen-Greensfunktionen G(x, y) auf dem CTP definiert sind, können sich die beiden Zeitargumente auf verschiedenen Ästen befinden und es werden vier Greensfunktionen definiert, mit + für den chronologischen und - für den antichronologischen Ast

Kapitel 2 | THEORETISCHE EINFÜHRUNG

des CTP:

$$iG^{c}(x,y) = iG^{++}(x,y) = \langle \hat{T}^{c}(\phi(x)\phi(y)) \rangle$$

$$(2.7)$$

$$iG^{<}(x,y) = iG^{+-}(x,y) = \langle \phi(y)\phi(x)\rangle$$
(2.8)

$$iG^{>}(x,y) = iG^{-+}(x,y) = \langle \phi(x)\phi(y) \rangle$$
(2.9)

$$iG^a(x,y) = iG^{--}(x,y) = \langle \hat{T}^a(\phi(x)\phi(y)) \rangle \quad , \tag{2.10}$$

x und y stehen hierbei für Vektoren der Art (t, \mathbf{r}) . Die Zeitordnung muss nur eingehalten werden, wenn sich beide Zeitargumente auf demselben Ast befinden. T^c , der kausale Zeitordnungsoperator, ordnet die Felder späterer Zeit nach links und T^a , der antikausale Zeitordnungsoperator, ordnet die Felder späterer Zeit nach rechts an; dies entspricht der Reihenfolge auf der Zeitkontur. Die Greensfunktionen G^{\gtrless} , Wightmanfunktionen genannt, beinhalten die Korrelationen des Systems, weshalb sie im kommenden Verlauf eine größere Rolle als die (anti-) kausale Greensfunktion spielen werden. Die Greensfunktionen (2.7)-(2.10) können auch entsprechend der Lage der Zeitargumente in Matrixform geschrieben werden [10, 19]:

$$G(x,y) = \begin{pmatrix} + & -\\ G^{c}(x,y) & G^{<}(x,y)\\ - & G^{>}(x,y) & G^{a}(x,y) \end{pmatrix} .$$
(2.11)

Für die Herleitung der Kadanoff-Baym (KB) Gleichungen wird die **Dyson-Schwinger Gleichung** benötigt, welche die vollständige Greensfunktion G mit der freien Greensfunktion G_0 über die Selbstenergie Σ in Verbindung bringt,

$$G(x,y) = G_0(x,y) + G_0(x,y)\Sigma(x,y)G(x,y) \quad .$$
(2.12)

Die weiteren Herleitungen stützen sich auf Ref. [10], nach der die Matrixform der Dyson-Schwinger Gleichung durch

$$\begin{pmatrix} G^{c}(x,y) & G^{<}(x,y) \\ G^{>}(x,y) & G^{a}(x,y) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} G^{c}_{0}(x,y) & G^{<}_{0}(x,y) \\ G^{>}_{0}(x,y) & G^{a}_{0}(x,y) \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} G^{c}_{0}(x,x') & G^{<}_{0}(x,x') \\ G^{>}_{0}(x,x') & G^{a}_{0}(x,x') \end{pmatrix} \odot \begin{pmatrix} \Sigma^{c}(x',y') & -\Sigma^{<}(x',y') \\ -\Sigma^{>}(x',y') & \Sigma^{a}(x',y') \end{pmatrix} \\ \odot \begin{pmatrix} G^{c}(y',y) & G^{<}(y',y) \\ G^{>}(y',y) & G^{a}(y',y) \end{pmatrix},$$

$$(2.13)$$

gegeben ist. Das Zeichen \odot steht für eine Integration über die zwischenliegende Raum-Zeit-Variable x', bzw. y'. Die Selbstenergie Σ ist wie die Greensfunktion auf dem CTP definiert und beinhaltet Wechselwirkungen höherer Ordnung, die ein Teilchen während seiner Propagation erfährt. Der allgemeine Zusammenhang zwischen einer "nackten" Zweiteilchen-Wechselwirkung V, der Zweiteilchen-Greensfunktion (4-Punkt-Greensfunktion) und der Selbstenergie Σ sowie der Einteilchen-Greensfunk-tion in einer beliebigen Basis ist:

$$\Sigma(1; x') \odot G(x'; 1') = \frac{1}{2} \operatorname{Tr}_{(2=2')} \{ VG_2(1, 2; 1', 2') \} \quad .$$
(2.14)

Es stecken somit alle Wechselwirkungs-Effekte der Zweiteilchen-Greensfunktion in der Selbstenergie Σ .

Aus Linearkombinationen von diagonalen und nicht-diagonalen Matrixelementen können retardierte und avancierte Komponenten einer Funktion F auf dem CTP definiert werden:

$$F^{\rm R}(x,y) = F^{c}(x,y) - F^{<}(x,y) = F^{>}(x,y) - F^{a}(x,y) ,$$

$$F^{\rm A}(x,y) = F^{c}(x,y) - F^{>}(x,y) = F^{<}(x,y) - F^{a}(x,y) .$$
(2.15)

Die avancierten und retardierten Komponenten der Greensfunktion enthalten rein spektrale und keine statistischen Informationen [8].

Die skalare ϕ^4 -Theorie, die in dieser Arbeit als Beispiel einer wechselwirkenden Feldtheorie untersucht wird, besitzt die Lagrangedichte:

$$\mathcal{L}(x) = \frac{1}{2} \partial^x_\mu \phi(x) \partial^\mu_x \phi(x) - \frac{1}{2} m^2 \phi(x) - \frac{\lambda}{4!} \phi^4(x) \quad , \tag{2.16}$$

9

Kapitel 2 | THEORETISCHE EINFÜHRUNG

in welcher der inverse, freie Propagator über den negativen Differentialoperator der Klein-Gordon Gleichung $\hat{G}_{0x}^{-1} = -(\partial_{\mu}^{x}\partial_{x}^{\mu} + m^{2})$ definiert ist. Der freie Propagator ist die Lösung von der Klein-Gordon Gleichung der Art, dass in Matrixschreibweise

$$\hat{G}_{0x}^{-1} \begin{pmatrix} G_0^c(x,y) & G_0^<(x,y) \\ G_0^>(x,y) & G_0^a(x,y) \end{pmatrix} = \delta(\mathbf{x} - \mathbf{y}) \begin{pmatrix} \delta(x_0 - y_0) & 0 \\ 0 & -\delta(x_0 - y_0) \end{pmatrix} = \delta(\mathbf{x} - \mathbf{y}) \delta_p(x_0 - y_0) \quad ,$$
(2.17)

$$\hat{G}_{0x}^{-1} G_0^{R/A}(x, y) = \delta(x - y) \quad , \tag{2.18}$$

gilt, mit δ_p als der auf dem CTP definierten Deltafunktion. Für die Ableitung der KB Gleichungen muss (2.13) mit dem inversen, freien Propagator \hat{G}_{0x}^{-1} von links multipliziert werden. Nach anschließender Ausmultiplikation der Matrizen werden die **Kadanoff-Baym Gleichungen** erhalten:

$$-(\partial_{\mu}^{x}\partial_{x}^{\mu}+m^{2})G^{R/A}(x,y) = \delta(x-y) + \Sigma^{R/A}(x,x') \odot G^{A/R}(x',y) \quad ,$$
(2.19)

$$-(\partial_{\mu}^{x}\partial_{x}^{\mu}+m^{2})G^{\gtrless}(x,y)=\Sigma^{\mathrm{R}}(x,x')\odot G^{\gtrless}(x',y)+\Sigma^{\gtrless}(x,x')\odot G^{\mathrm{A}}(x',y)\quad,\qquad(2.20)$$

wobei sich auf die retardierten und avancierten, bzw. die Wightman-Komponenten \geq beschränkt wurde. Die Deltafunktion entfällt für die Wightman-Komponenten, da sich die Zeitargumente auf unterschiedlichen Ästen befinden. Die Propagation der Greensfunktionen entlang der zweiten Variable y ist durch die adjungierten Gleichungen,

$$-(\partial^{y}_{\mu}\partial^{\mu}_{y} + m^{2})G^{R/A}(x,y) = \delta(x-y) + G^{R/A}(x,x') \odot \Sigma^{R/A}(x',y) \quad ,$$
(2.21)

$$-(\partial^y_\mu \partial^\mu_y + m^2) G^{\gtrless}(x,y) = G^{\mathcal{R}}(x,x') \odot \Sigma^{\gtrless}(x',y) + G^{\gtrless}(x,x') \odot \Sigma^{\mathcal{A}}(x',y) \quad , \quad (2.22)$$

gegeben. Bemerkenswert ist, dass die Zeitentwicklung der retardierten, bzw. avancierten Greensfunktionen nur von retardierten, bzw. avancierten Größen abhängt.

Für die Lösung der KB Gleichungen ist die Berechnung der Selbstenergien erforderlich, welche aus der effektiven Wirkung $\Gamma[G]$ hergeleitet werden [17],

$$\Gamma[G] = \Gamma^0[G_0] + \frac{i}{2} [\ln(1 - \odot_p G_0 \odot_p \Sigma) + \odot_p G \odot_p \Sigma] + \Phi[G] \quad . \tag{2.23}$$

Gleichung (2.23) geht von einem verschwindenden Vakuumerwartungswert $\langle 0|\phi(x)|0\rangle$ und von skalaren, symmetrisierten Feldern aus. $\Gamma^0[G_0]$ hängt nur von der freien Greensfunktion ab, weshalb es als Konstante in die Berechnungen eingeht. In $\Phi[G]$ sind alle geschlossenen Zwei-Teilchen-irreduziblen (2PI) Diagramme zusammengefasst. 2PI Dia-

10

gramme sind Diagramme, bei denen durch "Zerschneiden" zweier Propagatorlinien, bzw. zweier funktionaler Ableitungen nach der vollen Greensfunktion keine voneinander getrennten Diagramme entstehen. Für eine Herleitung der Selbstenergie wird die Variation der effektiven Wirkung $\Gamma[G]$ betrachtet. Es wird vorausgesetzt, dass die Variation stationär ist und somit $\delta\Gamma = 0$,

$$\delta\Gamma = 0 = \frac{i}{2} \Sigma \,\delta G - \frac{i}{2} \frac{G_0}{1 - G_0 \Sigma} \delta\Sigma + \frac{i}{2} G \,\delta\Sigma + \delta\Phi$$
$$= \frac{i}{2} \Sigma \,\delta G - \frac{i}{2} \underbrace{\frac{1}{G_0^{-1} - \Sigma}}_{=G} \delta\Sigma + \frac{i}{2} G \,\delta\Sigma + \delta\Phi$$
$$= \frac{i}{2} \Sigma \,\delta G + \delta\Phi \quad .$$
(2.24)

$$\Rightarrow \Sigma = 2i \frac{\delta \Phi}{\delta G} \quad . \tag{2.25}$$

Die Selbstenergien Σ werden somit durch Öffnen einer Propagatorlinie in den irreduziblen Diagrammen Φ erhalten. Die so berechneten Selbstenergien erfüllen nach Ref. [7] die zugrundeliegenden Erhaltungsgrößen, wie Energie, Impuls oder Kausalität.

Die Berechnung der Selbstenergie muss auf eine gewisse Ordnung der Kopplungskonstante, bzw. Anzahl der Schleifen innerhalb eines Diagramms beschränkt werden, da Φ für sich genommen unendlich viele Beiträge besitzt. Im Fall der skalaren ϕ^4 -Theorie in 2+1 Dimensionen sind Selbstenergien bis zur zweiten Ordnung ausreichend. In zweiter Ordnung der Kopplungskonstante λ treten zwei Beiträge zu Φ auf:

$$i\Phi = -\frac{i\lambda}{8} \int d^{d+1}x \ G(x,x)^2 - \frac{\lambda^2}{48} \int d^{d+1}x \int d^{d+1}y \ G(x,y)G(x,y)G(y,x)G(y,x) \quad .$$
(2.26)

Diese Terme sind in Abb. 2.2 diagrammatisch dargestellt.



Abb. 2.2 – Die zwei Diagramme, die das Funktional Φ im Fall der Lagrangedichte (2.16) bilden. Jede Linie entspricht einer vollständigen Greensfunktion. Aus den Unterabbildungen (a) und (b) werden die tadpole- bzw. die sunset-Selbstenergie durch "Aufschneiden" einer geschlossenen Linie erhalten.

Die Selbstenergien (2.25) ergeben sich bis in zweiter Ordnung in λ zu:

$$\Sigma(x,y) = 2i \frac{\delta\Phi}{\delta G(y,x)} = -\frac{i\lambda}{2} G(x,x) - \frac{\lambda^2}{6} G(x,y) G(x,y) G(y,x)$$

= $-\frac{\lambda}{2} i G(x,x) - \frac{\lambda^2}{6} [G(x,y)]^3$
= $\Sigma_p^{\delta} \delta(x_0 - y_0) + \theta_p(x_0 - y_0) \Sigma^>(x,y) + \theta_p(y_0 - x_0) \Sigma^<(x,y),$
(2.27)

wobei δ_p in (2.17) definiert ist. θ_p ist die auf dem CTP definierte Heaviside Stufenfunktion und berücksichtigt ebenfalls die Reihenfolge der Zeitargumente auf dem CTP. Die Selbstenergie enthält einen lokalen Σ^{δ} und nichtlokalen Anteil Σ^{\gtrless} . Der lokale Anteil der Selbstenergie $\Sigma^{\delta} \sim \lambda$ ergibt einen direkten Beitrag zur Masse der Felder und der nichtlokale Anteil $\Sigma^{\gtrless} \sim \lambda^2$ enthält höhere Korrelationen der Felder und ist verantwortlich für die Dynamik, bzw. Äquilibrierung des Systems.

Bei Annahme eines räumlich homogenen Systems bietet es sich an die Rechnungen im Phasenraum auszuführen und die Ortsabhängigkeit auszuintegrieren. Mit der Wigner-Transformation, die eine Fourier-Transformation über die Relativkoordinaten um die Schwerpunktskoordinate ist, kann dies erreicht werden [20]. Für den Übergang von Ortszu Impulskoordinaten sind die Relativkoordinaten $\mathbf{r} = \mathbf{x} - \mathbf{y}$ und die Schwerpunktskoordinaten $\mathbf{R} = \frac{1}{2}(\mathbf{x} + \mathbf{y})$, womit sich für die Wigner-Transformierte der Funktion f(x, y)in d räumlichen Dimensionen,

$$\tilde{f}(\mathbf{p}, x_0, y_0) = \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}^d r \ f(\mathbf{R} + \mathbf{r}/2, x_0; \mathbf{R} - \mathbf{r}/2, y_0) \,\mathrm{e}^{i\,\mathbf{p}\cdot\mathbf{r}} \quad , \qquad (2.28)$$

ergibt, wobei die Abhängigkeit von der Schwerpunktskoordinate \mathbf{R} unterdrückt ist, da hier von einem räumlich homogenen System ausgegangen wird. Die so Wignertransformierten Funktionen sind für gleiche Zeiten rein imaginär. Die KB Gleichungen der Wightman-Komponenten besitzen im Impulsraum nach Wigner-Transformation mit ausgeschriebenen Integralen die folgende Gestalt:

$$\partial_{t_1}^2 G^{\gtrless}(\mathbf{p}, t_1, t_2) = -(\mathbf{p}^2 + m^2 - \Sigma^{\delta}(t_1))G^{\gtrless}(\mathbf{p}, t_1, t_2) - \int_{t_0}^{t_1} \mathrm{d}z \, [\Sigma^{>}(\mathbf{p}, t_1, z) - \Sigma^{<}(\mathbf{p}, t_1, z)]G^{\gtrless}(\mathbf{p}, z, t_2) + \int_{t_0}^{t_2} \mathrm{d}z \, \Sigma^{\gtrless}(\mathbf{p}, t_1, z)[G^{>}(\mathbf{p}, z, t_2) - G^{<}(\mathbf{p}, z, t_2)] = -(\mathbf{p}^2 + m^2 - \Sigma^{\delta}(t_1))G^{\gtrless}(\mathbf{p}, t_1, t_2) + I_1^{\gtrless}(\mathbf{p}, t_1, t_2) , \qquad (2.29)$$

wobei die Zeitintegrale in den Größen I_1^{\gtrless} zusammengefasst sind. Die Gleichung mit der Ableitung nach der zweiten Zeitvariablen enspricht:

$$\partial_{t2}^{2} G^{\gtrless}(\mathbf{p}, t_{1}, t_{2}) = -(\mathbf{p}^{2} + m^{2} - \Sigma^{\delta}(t_{2}))G^{\gtrless}(\mathbf{p}, t_{1}, t_{2}) - \int_{t_{0}}^{t_{1}} \mathrm{d}z \, [G^{>}(\mathbf{p}, t_{1}, z) - G^{<}(\mathbf{p}, t_{1}, z)]\Sigma^{\gtrless}(\mathbf{p}, z, t_{2}) + \int_{t_{0}}^{t_{2}} \mathrm{d}z \, G^{\gtrless}(\mathbf{p}, t_{1}, z)[\Sigma^{>}(\mathbf{p}, z, t_{2}) - \Sigma^{<}(\mathbf{p}, z, t_{2})] = -(\mathbf{p}^{2} + m^{2} - \Sigma^{\delta}(t_{2}))G^{\gtrless}(\mathbf{p}, t_{1}, t_{2}) + I_{2}^{\gtrless}(\mathbf{p}, t_{1}, t_{2}) \quad .$$

$$(2.30)$$

Von den Gleichungen (2.20), (2.22) zu (2.29), (2.30) wurde außerdem die allgemeine Definition einer retardierten/avancierten Funktion in Abhängigkeit der Wightman-Funktionen (2.15) eingesetzt.

Um Divergenzen im UV-Bereich zu vermeiden müssen der Lagrangedichte noch Counterterme beigefügt und bestimmt werden, welche einen Beitrag zur effektiven Masse der Teilchen liefern. Für jedes verwendete Diagramm der Selbstenergie ist ein Counterterm erforderlich. Auf die explizite Berechnung der Counterterme wird in dieser Arbeit nicht weiter eingegangen; für die konkrete Berechnung der Counterterme und ein effizientes numerisches Verfahren zur Lösung der KB Gleichungen in Abhängigkeit der Zeit und des Impulses sei auf Ref. [8] verwiesen.

Im Rest dieses Abschnitts wird auf Eigenschaften der Spektralfunktion A(x, y) eingegangen und wie diese aus den zeitabhängigen Greensfunktionen extrahiert werden kann.

Kapitel 2 | THEORETISCHE EINFÜHRUNG

Durch numerische Lösung der KB Gleichungen (2.29), (2.30) erhält man Zugang zur vollständigen Nichtgleichgewichts-Entwicklung des Systems. Die Spektralfunktion ist für skalare, symmetrisierte Felder ϕ durch

$$A(x,y) = \langle [\phi(x),\phi(y)]_{-} \rangle = i[G^{>}(x,y) - G^{<}(x,y)] = i[G^{R}(x,y) - G^{A}(x,y)]$$
(2.31)

definiert, bzw. durch Ausnutzung der Zeitreflektionssymmetrie in der Impuls-Zeit Darstellung durch

$$A(\mathbf{p}, t_1, t_2) = i[G^{<}(\mathbf{p}, t_2, t_1) - G^{<}(\mathbf{p}, t_1, t_2)] = i[-[G^{<}(\mathbf{p}, t_1, t_2)]^* - G^{<}(\mathbf{p}, t_1, t_2)]$$

= $-2i \operatorname{Re} \left(G^{<}(\mathbf{p}, t_1, t_2)\right)$ (2.32)

Die Spektralfunktion in Abhängigkeit der Energie p_0 ergibt sich aus der Fouriertransformation der Relativzeit Δt zu jedem mittleren Zeitpunkt t:

$$\bar{A}(\mathbf{p}, p_0, t) = \int_{-\infty}^{\infty} d\Delta t \, \exp(i\Delta t \, p_0) A(\mathbf{p}, t_1 = t + \Delta t/2, t_2 = t - \Delta t/2) \quad , \qquad (2.33)$$

wobei \bar{A} für die vollständig Wigner-transformierte Spektralfunktion A steht. Unter Betrachtung der vollständig Wigner-transformierten, retardierten Greensfunktion und Selbstenergie für räumlich homogene Systeme, bzw. in erster Ordnung der Gradientenentwicklung (siehe Anhang A), ergibt sich nach [17] folgender Zusammenhang zu der Spektralfunktion \bar{A} und der spektralen Breite $\bar{\Gamma}$ des Systems:

$$\bar{G}^{R/A} = \operatorname{Re}\left(\bar{G}^{R}\right) \pm i\operatorname{Im}\left(\bar{G}^{R}\right) = \operatorname{Re}\left(\bar{G}^{R}\right) \mp i\,\bar{A}/2 \quad , \tag{2.34}$$

$$\bar{\Sigma}^{R/A} = \operatorname{Re}\left(\bar{\Sigma}^{R}\right) \pm i\operatorname{Im}\left(\bar{\Sigma}^{R}\right) = \operatorname{Re}\left(\bar{\Sigma}^{R}\right) \mp i\bar{\Gamma}/2 \quad . \tag{2.35}$$

Nach weiterem Einsetzen entsteht für die Spektralfunktion:

$$\bar{A}(\mathbf{p}, p_0, t) = \frac{\Gamma}{\left(p_0^2 - \omega_0^2\right)^2 + \bar{\Gamma}^2/4} ,$$

$$\bar{\Gamma} = -2 \operatorname{Im} \left(\bar{\Sigma}^R\right) ,$$

$$\omega_0^2 = \mathbf{p}^2 + m^2 - \bar{\Sigma}^\delta + \operatorname{Re} \left(\bar{\Sigma}^R\right) ,$$
(2.36)

was der Form einer relativistischen Breit-Wigner Funktion entspricht. Die Spektralfunktion muss außerdem für alle Zeiten t und Impulse **p** die Normierung

$$\int_{-\infty}^{\infty} \frac{\mathrm{d}p_0}{2\pi} \ p_0 \bar{A}(\mathbf{p}, p_0, t) = 1$$
(2.37)

erfüllen, was einer Umformulierung der Kommutatorrelation der Felder ϕ zur gleichen Zeit t entspricht.

Für den späteren Vergleich mit dem verwendeten Tranportansatz ist der Zusammenhang der Greensfunktion mit der Verteilungsfunktion des Phasenraums $\bar{N}(\mathbf{p}, t)$ erforderlich, welche die Besetzungswahrscheinlichkeit des Phasenraumelements um den Impuls \mathbf{p} zum Zeitpunkt t beschreibt. Die Verteilungsfunktion $\bar{N}(\mathbf{p}, p_0, t)$ kann wie folgt für Bosonen durch die Spektralfunktion mit den Wightman-Greensfunktionen G^{\gtrless} in Zusammenhang gebracht werden:

$$i\bar{G}^{<}(\mathbf{p}, p_{0}, t) = \bar{A}(\mathbf{p}, p_{0}, t)\bar{N}(\mathbf{p}, p_{0}, t) ,$$

$$i\bar{G}^{>}(\mathbf{p}, p_{0}, t) = \bar{A}(\mathbf{p}, p_{0}, t)[\bar{N}(\mathbf{p}, p_{0}, t) + 1] .$$
(2.38)

Die Berechnung der Verteilungsfunktion des Impulsraums erfolgt über [21]

$$\bar{N}(\mathbf{p},t) = \sqrt{G^{<}(\mathbf{p},x_0,y_0)\partial_{x_0}\partial_{y_0}G^{<}(\mathbf{p},x_0,y_0)}\Big|_{x_0=y_0=t} -\frac{1}{2} \quad .$$
(2.39)

Wie (2.38) entnommen wird ist die Wigner-transformierte Wightman-Funktion $i\bar{G}^{<}(\mathbf{p}, p_0, t)$ mit der Phasenraumdichte des Systems zu identifizieren, womit die Ergebnisse aus der Lösung der KB Gleichungen (2.29), (2.30) mit einem transporttheoretischen Ansatz verglichen werden können. In dem folgenden Kapitel werden zu diesem Zweck die Grundlagen für eine Transportsimulation der KB Gleichungen in einem homogenen Volumen V besprochen.

2.2 Transport

2.2.1 Nicht-relativistische on-shell Transporttheorie

In dieser Arbeit werden die Ergebnisse, die durch die Lösung der KB Gleichungen erhalten werden, mit denen einer off-shell Transportsimulation verglichen. Zu diesem Zweck werden in diesem Abschnitt die wichtigsten Grundzüge einer Transportsimulation erläutert.

Kapitel 2 | THEORETISCHE EINFÜHRUNG

Transportgleichungen beschreiben die zeitliche Anderung der Dichtematrix ρ_N eines Vielteilchensystems mit einer Gesamtteilchenzahl N. Die zeitliche Entwicklung ist durch die Von-Neumann Gleichung bestimmt,

$$i\frac{\partial}{\partial t}\rho_N(1,\ldots,N;1,\ldots,N';t) = [H_N;\rho_N] \quad , \tag{2.40}$$

mit H_N dem Hamiltonoperator des N-Teilchensystems und den Zahlen 1,..., N in abkürzender Schreibweise für die verschiedenen Eigenschaften (Spin, Ort, Impuls, Ladung,...) jedes Teilchens. Der Hamiltonoperator H_N kann in einen Einteilchen- und Mehrteilchenanteil aufgespalten werden, wobei der Mehrteilchenanteil im Folgenden auf die Zweiteilchenwechselwirkung $V_{i,j}$ beschränkt wird. Der betrachtete Hamiltonoperator sei gegeben durch:

$$H_N = \sum_{i=1}^N H_i^0 + \sum_{1 \le i < j \le N} V_{i,j} \quad \text{mit} \quad H_i^0 = T_i + U_i^{\text{ex}},$$
(2.41)

wobei T_i die kinetische Energie des Teilchens *i* und U_i^{ex} das Potential eines äußeren mittleren Felds an der Stelle des Teilchens *i* ist. Die Gleichung (2.40) ist in der angegebenen Form nicht lösbar, weshalb Näherungen für die Dichtematrix eingeführt werden müssen. Eine Näherung besteht in der Verwendung von reduzierten Dichtematrizen $\rho_n(1, \ldots, n; 1', \ldots, n'; t)$, die aus der Spurbildung der Teilchen $n + 1, \ldots, N$ aus der N-Teilchendichtematrix ρ_N definiert sind:

$$\rho_n = \frac{1}{(N-n)!} \operatorname{Tr}_{n+1,\dots,N} \rho_N \quad . \tag{2.42}$$

Die Normierung der Einteilchen-Dichtematrix $\rho_1 = \rho$ ist so gewählt, dass die Spur über die Einteilchen-Dichtematrix gerade die Gesamt-Teilchenzahl N ergibt. Nach der Anwendung der Von-Neumann Gleichung auf die reduzierte Dichtematrix ρ_n wird die **BBGKY**-Hierarchie (benannt nach den Autoren **B**ogolyubov, **B**orn, **G**reen, **K**irkwood und **Y**von) erhalten,

$$i\frac{\partial}{\partial t}\rho_n = \sum_{i=1}^n [H_i^0, \rho_n] + \sum_{1 \le i < j \le n} [V_{i,j}, \rho_n] + \operatorname{Tr}_{n+1} \sum_{i=1}^n [V_{i,n+1}, \rho_{n+1}] \quad ,$$
(2.43)

die reduzierte Dichtematrizen verschiedener Teilchenzahl über Differentialgleichungen 1. Ordnung in der Zeit koppelt. In den folgenden Betrachtungen reichen die Gleichungen für n = 1 und 2 aus:

$$i\frac{\partial}{\partial t}\rho_1 = [H_1^0, \rho_1] + \text{Tr}_2[V_{1,2}, \rho_2] \quad ,$$
 (2.44)

$$i\frac{\partial}{\partial t}\rho_2 = \sum_{i=1}^{2} [H_i^0, \rho_1] + [V_{1,2}, \rho_2] + \text{Tr}_3[V_{1,3} + V_{2,3}, \rho_3] \quad .$$
(2.45)

Das Gleichungssystem ist in Form von (2.45) noch nicht geschlossen, weshalb eine weitere Näherung für die reduzierten Dichtematrizen getroffen werden muss. Die Näherung besteht darin, die reduzierten Dichtematrizen durch symmetrisierte (Bosonen), bzw. antisymmetrisierte (Fermionen) Produkte aus Einteilchen-Dichtematrizen und Wechselwirkungskorrekturen in Form von Korrelationsfunktionen darzustellen, was als **Cluster-Entwicklung** bekannt ist. Bei Vernachlässigung der Dreiteilchen-Korrelationsfunktion ist das Gleichungssystem (2.45) geschlossen. Die konkreten Berechnungen können in den Referenzen [22–24] nachvollzogen werden. Wird zusätzlich noch die Zweiteilchen-Korrelationsfunktion vernachlässigt und die Einteilchen-Dichtematrizen in der Phasenraumdarstellung/ Wigner-Repräsentation angegeben, erhält man die **Vlasov Gleichung**:

$$\left(\frac{\partial}{\partial t} + \frac{\mathbf{p}}{m} \cdot \nabla_r - \nabla_r U(\mathbf{r}, t) \cdot \nabla_p\right) \rho(\mathbf{r}, \mathbf{p}, t) = 0 \quad , \tag{2.46}$$

mit $\rho(\mathbf{r}, \mathbf{p}, t)$ der Phasenraumdichte (Einteilchen-Dichtematrix in der Phasenraumdarstellung) in Abhängigkeit des Ortes \mathbf{r} sowie des Impulses \mathbf{p} zur Zeit t und U dem Potential des mittleren (selbstkonsistenten) Feldes. Die Vlasov Gleichung kann auch als

$$\left(\frac{\partial}{\partial t} + \frac{\partial \mathbf{r}}{\partial t} \cdot \nabla_r + \frac{\partial \mathbf{p}}{\partial t} \cdot \nabla_p\right) \rho(\mathbf{r}, \mathbf{p}, t) = 0$$
(2.47)

geschrieben werden, womit durch Vergleich der beiden Gleichungen (2.46) und (2.47) in den verwendeten Näherung \mathbf{r} und \mathbf{p} Lösungen der klassischen Bewegungsgleichungen sind. Gleichung (2.47) resultiert aus dem Erhalt der Gesamt-Teilchenzahl N im nichtrelativistischen Fall:

$$\frac{\mathrm{d}N}{\mathrm{d}t} = \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\mathrm{d}^d r \,\mathrm{d}^d p}{(2\pi)^d} \rho(\mathbf{r}, \mathbf{p}, t) = 0 \quad , \qquad (2.48)$$

wobei die Spurbildung in der Phasenraumdarstellung durch das Integral über den Ortsund Impulsraum ersetzt wurde. Die Phasenraumdichte beschreibt die Wahrscheinlichkeit ein Teilchen am Ort \mathbf{r} mit Impuls \mathbf{p} zum Zeitpunkt t zu finden und ist deshalb stets

Kapitel 2 | THEORETISCHE EINFÜHRUNG

größer gleich Null, weshalb zur Erfüllung der Gleichung (2.48), bei Ausschluss des Falls $\rho = 0$, die Ableitung der Phasenraumdichte nach der Zeit verschwinden muss:

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\rho(\mathbf{r},\mathbf{p},t) = 0 = \left(\frac{\partial}{\partial t} + \frac{\partial\mathbf{r}}{\partial t}\cdot\nabla_r + \frac{\partial\mathbf{p}}{\partial t}\cdot\nabla_p\right)\rho(\mathbf{r},\mathbf{p},t) \quad , \tag{2.49}$$

womit Gleichung (2.47) gezeigt ist.

Aus der Vlasov Gleichung heraus lässt sich der **Testteilchen-Ansatz**, bzw. die Testteilchen-Methode definieren, bzw. herleiten. In dem Testteilchen-Ansatz wird die Phasenraumdichte als ein Ensemble von N punktförmigen Teilchen betrachtet, welche alle die klassischen Bewegungsgleichungen erfüllen. Für den korrekten Limes müssten unendlich viele Ensembles betrachtet werden, was in der Praxis nicht möglich ist, aber um große statistische Fluktuationen zu vermeiden sollte die Anzahl der Systeme *num* möglichst groß gewählt werden. Die Form der Phasenraumdichte in dem Testteilchen-Ansatz ergibt sich für die Anzahl der parallel betrachteten Systeme des Ensembles *num* $\rightarrow \infty$ in *d* räumlichen Dimensionen zu

$$\rho(\mathbf{r}, \mathbf{p}, t) = \frac{(2\pi)^d}{num} \sum_{i=1}^{num \cdot N} \delta^d(\mathbf{r} - \mathbf{r}_i(t)) \delta^d(\mathbf{p} - \mathbf{p}_i(t)) \quad .$$
(2.50)

Der Vorfaktor ist erforderlich um die Normierung auf die Teilchenzahl N nach (2.48) zu gewährleisten. Mit der in (2.50) definierten Phasenraumdichte berechnet sich der Erwartungswert eines Einteilchen-Operators \hat{O} nach:

$$\langle \hat{O}(t) \rangle = \operatorname{Tr}(\rho(\mathbf{r}, \mathbf{p}, t) \hat{O}) = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\mathrm{d}^d r \, \mathrm{d}^d p}{(2\pi)^d} \, O(\mathbf{r}, \mathbf{p}, t) \frac{(2\pi)^d}{num} \sum_{i=1}^{num \cdot N} \delta^d(\mathbf{r} - \mathbf{r}_i) \delta^d(\mathbf{p} - \mathbf{p}_i)$$
$$= \frac{1}{num} \sum_{i=1}^{num \cdot N} O(\mathbf{r}_i, \mathbf{p}_i, t) \quad .$$
(2.51)

Für den Erwartungswert $\langle \hat{O}(t) \rangle$ muss also lediglich die entsprechende Größe eines jeden Teilchens aufsummiert und durch die Anzahl der in dem Ensemble enthaltenen Systeme num dividiert werden. Um eine Genauigkeit von etwa 1 % für $\langle \hat{O}(t) \rangle$ zu erhalten muss allein wegen des statistischen Fehlers, der proportional zu $1/\sqrt{num}$ ist, $num \geq 10000$ sein.

Systeme ohne weitere Korrelationen bergen keine interessante, neue Physik. Für die Berücksichtigung der Korrelationen in Form von Zweiteilchen-Kollisionen steht auf der rechten Seite der Gleichung (2.46) ein Kollisionsintegral $I_{coll}(t)$. Ein Beispiel für ein solches (2 \leftrightarrow 2)-Kollisionsintegral in Phasenraumdarstellung ist nach Uehling und Uhlenbeck [3]:

$$I_{\text{coll}}(\mathbf{r}, \mathbf{p}, t) = g \int \frac{\mathrm{d}^{d} p_{2}}{(2\pi)^{d}} \int \mathrm{d}\Omega \ v_{12} \frac{\mathrm{d}\sigma}{\mathrm{d}\Omega}(\mathbf{p}_{1} + \mathbf{p}_{2}, \mathbf{p}_{2} - \mathbf{p}_{4}) \\ \times \underbrace{\left[\rho(\mathbf{p}_{3}, t)\rho(\mathbf{p}_{4}, t)\bar{\rho}(\mathbf{p}_{1}, t)\bar{\rho}(\mathbf{p}_{2}, t)\right]}_{\text{gain}} - \underbrace{\rho(\mathbf{p}_{1}, t)\rho(\mathbf{p}_{2}, t)\bar{\rho}(\mathbf{p}_{3}, t)\bar{\rho}(\mathbf{p}_{4}, t)}_{\text{loss}}\right] ,$$

$$(2.52)$$

mit

 $\bar{\rho}(\mathbf{p},t) = 1 \pm \rho(\mathbf{p},t) + :$ Bosonen -: Fermionen

was die gleiche Struktur wie das Kollisionsintegral nach Boltzmann [1] besitzt, jedoch mit dem Zusatz, dass die quantenstatistischen Effekte des Pauliblockings und des Boseenhancements implementiert sind und der Driftterm entsprechend der Vlasovgleichung äußere und selbstkonsistente Felder berücksichtigt. In (2.52) steht g für den Entartungsfaktor der Teilchen. Eine konkrete Herleitung der Boltzmann-Uehling-Uhlenbeck Gleichung, bzw. Vlasov-Uehling-Uhlenbeck Gleichung (2.52) findet sich in Ref. [4].

Typisch für allgemeine Kollisionsintegrale ist die gain- und loss-Struktur. Der gain-Term steht dafür, dass der Stoß in das Phasenraumelement $(\mathbf{r}, \mathbf{p}, t)$ hinein und der loss-Term dafür, dass der Stoß aus dem Phasenraumelement $(\mathbf{r}, \mathbf{p}, t)$ heraus erfolgt, wobei für die Besetzung der möglichen Endzustände die Fermi/Bose-Eigenschaften der Teilchen von Bedeutung sind.

2.2.2 Relativistische off-shell Tranporttheorie

Die bisherigen Betrachtungen waren nicht-relativistisch und auf die Massenschale der Teilchen beschränkt. Im relativistischen off-shell Fall, unter Vernachlässigung der lokalen Selbstenergien und Terme für die direkte Propagation der Spektralfunktion¹, ergibt sich die allgemeine Transportgleichung nach [25] zu

$$p^{\mu}\partial^{x}_{\mu}F_{i}(x,p) = (p_{0}\frac{\partial}{\partial t} + \mathbf{p} \cdot \nabla_{r})F_{i}(x,p) = I^{i}_{\text{coll}} \quad , \qquad (2.53)$$

¹Diese Zusatzterme spielen nur für räumlich inhomogene Systeme eine Rolle und können für die hier betrachteten Systeme vernachlässigt werden.

Kapitel 2 | THEORETISCHE EINFÜHRUNG

wobei $F_i(x, p)$ die kovariante 2(d + 1)-dimensionale Phasenraumdichte eines off-shell Teilchens mit den Quantenzahlen *i* ist. Die Phasenraumdichte *F* in (2.53) ist über

$$F(x,p) = A(x,p)f(x,p) = iG^{<}(x,p)$$
(2.54)

gegeben, wobei A(x, p) die Spektralfunktion und f(x, p) die Besetzungswahrscheinlichkeit im Phasenraumvolumen widerspiegelt. Das Kollisionsintegral für eine Reaktion von n Teilchen mit den Quantenzahlen i, ν im Eingangs- und m Teilchen mit den Quantenzahlen κ im Ausgangskanal ist unter Verwendung von "detailed balance" nach Ref. [26] gegeben durch

$$\begin{split} I_{\text{coll}}^{i}[n \leftrightarrow m] &= \\ \frac{1}{2} N_{n}^{m} \sum_{\nu} \sum_{\kappa} \int \left(\prod_{j=2}^{n} \frac{\mathrm{d}^{d+1} p_{j}}{(2\pi)^{d+1}} A_{j}(x, p_{j}) \theta(p_{j}^{0}) \right) \left(\prod_{k=1}^{m} \frac{\mathrm{d}^{d+1} p_{k}}{(2\pi)^{d+1}} A_{k}(x, p_{k}) \theta(p_{k}^{0}) \right) \\ &\times A_{i}(x, p) \theta(p^{0}) W_{n,m}(p, p_{j}; i, \nu | p_{k}; \kappa) (2\pi)^{d+1} \delta^{d+1} \left(p^{\mu} + \sum_{j=2}^{n} p_{j}^{\mu} - \sum_{k=1}^{m} p_{k}^{\mu} \right) \\ &\times \left[\prod_{k=1}^{m} f_{k}(x, p_{k}) \tilde{f}_{i}(x, p) \prod_{j=2}^{n} \tilde{f}_{j}(x, p_{j}) - f_{i}(x, p) \prod_{j=2}^{n} f_{j}(x, p_{j}) \prod_{k=1}^{m} \tilde{f}_{k}(x, p_{k}) \right] \quad , \end{split}$$
(2.55)

$$\tilde{f} = 1 \pm f \quad . \tag{2.56}$$

Der Faktor N_n^m steht für die Multiplizität eines Zustands im Ein- oder Ausgangskanal und wird im Folgenden auf 1 gesetzt, da vollständig symmetrisierte, bzw. antisymmetrisierte Zustände betrachtet werden. $W_{n,m}$ ist das Übergangsmatrixelement zum Quadrat und beträgt in der ϕ^4 -Theorie den Wert λ^2 . "detailed balance" ist die Bedingung, dass im Gleichgewicht $(t \to \infty)$ das Kollisionsintegral verschwindet, was gleichbedeutend damit ist, dass die Hin- und Rückreaktion gleich wahrscheinlich ist. Die Spektralfunktion A erfüllt im weiteren Verlauf dieselbe Normierung wie in Gleichung (2.37). Das gesamte Kollisionsintegral errechnet sich durch Summation über n und m zu $I_{\rm coll} = \sum_n \sum_m I_{\rm coll}[n \leftrightarrow m]$. Die Änderung der Teilchenzahl des Typs $n \to m$ in einem Raum-Zeit Volumen d^dr dt = dV dt wird durch Multiplikation mit 2 und der Integration aller eingehenden Impulse und Energien über den loss-Term von $I_{\text{coll}}[n \leftrightarrow m]$ erhalten:

$$\frac{\mathrm{d}N_{\mathrm{coll}}[n \to m]}{\mathrm{d}t\mathrm{d}V} = \sum_{i,\nu} \sum_{\kappa} \int \left(\prod_{j=1}^{n} \frac{\mathrm{d}^{d+1}p_{j}}{(2\pi)^{d+1}} A_{j}(x,p_{j})\theta(p_{j}^{0}) \right) \left(\prod_{k=1}^{m} \frac{\mathrm{d}^{d+1}p_{k}}{(2\pi)^{d+1}} A_{k}(x,p_{k})\theta(p_{k}^{0}) \right) \times W_{n,m}(p_{j};i,\nu|p_{k};\kappa)(2\pi)^{d+1}\delta^{d+1} \left(\sum_{j=1}^{n} p_{j}^{\mu} - \sum_{k=1}^{m} p_{k}^{\mu} \right) \prod_{j=1}^{n} f_{j}(x,p_{j}) \prod_{k=1}^{m} \tilde{f}_{k}(x,p_{k}) \quad .$$
(2.57)

Dieser Ausdruck kann nach Einführung des *n*-Teilchen Phasenraums R_n weiter zusammengefasst werden. Der R_n hängt lediglich von dem eingehenden (d+1)-Impuls und den Massen der *n* Teilchen im Endzustand ab:

$$R_n(P^{\mu}, M_1, \dots, M_n) = \int \left(\prod_{k=1}^n \frac{\mathrm{d}^{d+1}p_k}{(2\pi)^{d+1}} A_k(p_k)\theta(p_k^0)\right) (2\pi)^{d+1} \delta^{d+1} \left(P^{\mu} - \sum_{j=1}^n p_j^{\mu}\right).$$
(2.58)

Zwischen den Phasenräumen R_n und R_{n-1} kann eine Rekursionsrelation aufgestellt werden:

$$R_n(P^{\mu}, M_1, \dots, M_n) = \int \frac{\mathrm{d}^4 p_n}{(2\pi)^4} R_{n-1}(P^{\mu} - p_n^{\mu}, M_1, \dots, M_{n-1}) \quad , \tag{2.59}$$

die eine Berechnung von R_n aus R_{n-1} erlaubt. Eingesetzt in Gleichung (2.57) ergibt sich für die Übergangsrate im Volumenelement dV

$$\frac{\mathrm{d}N_{\mathrm{coll}}[n \to m]}{\mathrm{d}t\mathrm{d}V} = \sum_{i,\nu} \sum_{\kappa} \int \left(\prod_{j=1}^{n} \frac{\mathrm{d}^{d+1}p_{j}}{(2\pi)^{d+1}} A_{j}(x,p_{j})\theta(p_{j}^{0}) \right) W_{n,m}(p_{j};i,\nu|p_{k};\kappa) \\ \times R_{m} \left(P^{\mu} = \sum_{j=1}^{n} p_{j}^{\mu}; M_{1},\ldots,M_{m} \right) \prod_{j=1}^{n} f_{j}(x,p_{j}) \prod_{k=1}^{m} \tilde{f}_{k}(x,p_{k}) \quad .$$
(2.60)

Aus dieser Gleichung ist die Wahrscheinlichkeit, dass n Teilchen mit Impulsen p_j^{μ} eine Reaktion des Typs $n \to m$ durchführen, extrahierbar. Um eine dimensionslose Reaktionswahrscheinlichkeit zu erhalten, müssen die zugehörigen Terme noch mit entsprechenden

Kapitel 2 | THEORETISCHE EINFÜHRUNG

Faktoren dV und dt multipliziert werden:

$$P(n \to m)^{i,\nu}_{\kappa} = \int \left(\prod_{j=1}^{n} \frac{\mathrm{d}p_{j}^{0}}{2\pi} A_{j}(p_{j}) \theta(p_{j}^{0}) \right) W_{n,m}(p_{j}; i, \nu | p_{k}; \kappa) R_{m} \left(P^{\mu} = \sum_{j=1}^{n} p_{j}^{\mu}; M_{1}, \dots, M_{m} \right) \times \prod_{k=1}^{m} \tilde{f}_{k}(x, p_{k}) \mathrm{d}t \left(\frac{\mathrm{d}V}{\hbar c} \right)^{(4+d(-3+m)-m-n)/d} .$$

$$(2.61)$$

Mit Gleichung (2.61) werden in dieser Arbeit die Übergangswahrscheinlichkeiten berechnet und für die Wahl der tatsächlich eintretenden Reaktionen verwendet. Das genaue Verfahren wird in dem Unterabschnitt 2.3 erläutert. In der Berechnung der Wahrscheinlichkeit treten für die in der ϕ^4 -Theorie möglichen 1 \leftrightarrow 3 und 2 \leftrightarrow 2 Reaktionen die Ein-, Zwei- und Dreiteilchenphasenräume sowie $W_{1,3}, W_{2,2}$ und $W_{3,1}$ auf. Die Quadrate der Übergangsmatrixelemente besitzen in der ϕ^4 -Theorie alle den Wert λ^2 . In dem Zwei- und Dreiteilchenphasenraum tauchen einige Mehrfachintegrale auf, deren Berechnung für beliebige Eingangsimpulse und -energien den größten Teil der Rechenzeit in Anspruch nehmen würde. Zu diesem Zweck wird sich bei den späteren Berechnungen auf das Schwerpunktssystem (Center-of-Mass System, CMS) beschränkt. Durch diese Beschränkung müssen die Phasenräume nur noch in Abhängigkeit der invarianten Masse \sqrt{s} und wegen der Spektralfunktionen in Abhängigkeit der spektralen Breite γ bestimmt werden.

2.2.3 Phasenräume

Einteilchenphasenraum

Für die Berechnung des Einteilchenphasenraums muss Gleichung (2.58) für n = 1 integriert werden. In diesem besonderen Fall ist weder eine Beschränkung auf das CMS noch eine Spezifikation der räumlichen Dimension d erforderlich:

$$R_1(P^{\mu}, M) = \int \frac{\mathrm{d}^{d+1}p}{(2\pi)^{d+1}} A(p^{\mu}) (2\pi)^{d+1} \delta^{d+1}(P^{\mu} - p^{\mu}) = A(P^{\mu}) \quad . \tag{2.62}$$

Den Einteilchenphasenraum bildet somit die Spektralfunktion des ausgehenden Teilchens mit dem (d+1)-Impuls P^{μ} des eingehenden Teilchens wegen der Energie-Impulserhaltung.

Zweiteilchenphasenraum



Abb. 2.3 – Off-shell Zweiteilchenphasenraum für zwei Teilchen mit einer Polmasse von 1 GeV in Abhängigkeit der spektralen Breite γ und der invarianten Masse \sqrt{s} nach (2.66).

Für die Bestimmung des Zweiteilchenphasenraums wird in d = 2 räumlichen Dimensionen gerechnet und als Spektralfunktion wird die Breit-Wigner Funktion

$$A(\omega, \mathbf{p}) = \frac{4\omega\gamma}{(\omega^2 - \mathbf{p}^2 - m^2)^2 + 4\omega^2\gamma^2}$$
(2.63)

gewählt bei der ω für die Energie des Teilchens und γ für die spektrale Breite steht. Die Form (2.63) ist nahezu identisch mit den in der KB Theorie berechneten Spektralfunktionen (2.36). Da in der Transportsimulation nur eine Teilchensorte (skalare Bosonen) enthalten sein werden, besitzen alle Teilchen eine Spektralfunktion der Form (2.63). Der Zweiteilchenphasenraum errechnet sich zu:

$$R_2(\sqrt{s}, M_1, M_2) = \int \frac{\mathrm{d}^3 p_1 \mathrm{d}^3 p_2}{(2\pi)^6} A(\omega_1, \mathbf{p}_1) \theta(\omega_1) A(\omega_2, \mathbf{p}_2) \theta(\omega_2)$$
(2.64)

$$\times (2\pi)^3 \delta^2 (-\mathbf{p}_1 - \mathbf{p}_2) \delta(\sqrt{s} - \omega_1 - \omega_2) \quad . \tag{2.65}$$

Durch die Deltafunktionen kann beispielsweise die Integration über p_2 vollständig ausgeführt werden, wodurch $\mathbf{p}_1 = -\mathbf{p}_2 = \mathbf{p}$ und $\omega_2 = \sqrt{s} - \omega$ gelten. Nach Transformation

Kapitel 2 | THEORETISCHE EINFÜHRUNG

auf Polarkoordinaten kann die entstehende Winkelintegration direkt ausgeführt werden,

$$R_2(\sqrt{s}, M_1, M_2) = \int_0^{\sqrt{s}} \frac{\mathrm{d}\omega}{2\pi} \int_0^\infty \frac{\mathrm{d}p}{2\pi} p A(\omega, \mathbf{p}) A(\sqrt{s} - \omega, -\mathbf{p}) \quad . \tag{2.66}$$

Die weiteren Berechnungen müssen numerisch durchgeführt werden. Der Zweiteilchenphasenraum wurde auf einem feinmaschigen Gitter in \sqrt{s} und γ für eine Polmasse von 1 GeV ausgerechnet und als Array in das Programm eingespeist. Der Bereich dieses Arrays ist in \sqrt{s} [0.1 GeV, 16 GeV] in 0.1 GeV Schritten und in γ [0.03 GeV, 0.99 GeV] in 0.01 GeV Schritten. Eine Darstellung des off-shell Zweiteilchenphasenraums findet sich in Abb. 2.3 als Funktion von \sqrt{s} und γ . Die wellenartigen Strukturen bei größeren invarianten Massen und kleinen Breiten γ stammen von der Genauigkeit der Integration. In diesen Bereichen ($\gamma \ll M$) wird der on-shell Zweiteilchenphasenraum verwendet, welcher der Limes des off-shell Phasenraums für $\gamma \to 0$ ist und in diesen Bereichen sehr gut mit dem off-shell Fall übereinstimmt. Der errechnete Phasenraum lässt sich auf Systeme anderer Massen skalieren, indem 1 GeV einer Masseneinheit gleichgesetzt wird.

Bei den on-shell Berechnungen geht die Spektralfunktion über in $A(\omega, \mathbf{p}) = 2\pi\delta(\omega^2 - E^2)$ mit $E = \sqrt{m^2 + p^2}$ als der on-shell Energie. Als Konsequenz ergibt sich das Energie
integral zu

$$\int \frac{\mathrm{d}\omega}{2\pi} A(\omega, \mathbf{p})\theta(\omega) = \frac{1}{2E} \quad . \tag{2.67}$$

Der on-shell Zweiteilchenphasenraum in d räumlichen Dimensionen hat die folgende Struktur,

$$R_2(P^{\mu}; M_1, M_2) = \frac{1}{(2\pi)^{2d}} \int \frac{\mathrm{d}^d p_1 \mathrm{d}^d p_2}{2E_1 2E_2} (2\pi)^{d+1} \delta^{d+1} (P^{\mu} - p_1^{\mu} - p_2^{\mu}) \quad . \tag{2.68}$$

Bei Betrachtung des CMS wird $\mathbf{P} = 0$ und es folgt durch Integration einer der beiden Integrationsvariablen unter Verwendung der δ -Funktionen $\mathbf{p}_1 = \mathbf{p} = -\mathbf{p}_2$. Anschließend wird in *d*-dimensionale Kugelkoordinaten transformiert

$$R_2(P^{\mu}; M_1, M_2) = \frac{1}{(2\pi)^{d-1}} \int \frac{\mathrm{d}\Omega_{d-1}\mathrm{d}p}{2E_1 2E_2} p^{d-1} \delta(\sqrt{s} \underbrace{-\sqrt{p^2 + m_1^2} - \sqrt{p^2 + m_2^2}}_{:=-g(p)}) \quad . \quad (2.69)$$

Nach Auflösung der δ -Funktion nach dem Relativimpuls des CMS p erhält man

$$p = \frac{\sqrt{\lambda(s, m_1^2, m_2^2)}}{2\sqrt{s}} \quad , \tag{2.70}$$

mit
$$\lambda(a, b, c) = (a - b - c)^2 - 4bc$$
 . (2.71)

Das Integral über p kann mit der δ -Funktion wie folgt ausgewertet werden:

$$1 = \int dg \,\delta(\sqrt{s} - g) = \int \frac{dg(p)}{dp} dp \delta(\sqrt{s} - g(p))$$
(2.72)

$$\Rightarrow \int dp \ \delta(\sqrt{s} - g(p)) = \left(\frac{dg(p)}{dp}\right)^{-1} = \left[p\left(\frac{1}{E_1} + \frac{1}{E_2}\right)\right]^{-1} = \frac{1}{p}\frac{E_1E_2}{E_1 + E_2}$$
(2.73)

Nach dem Einsetzen in Gleichung (2.69) mit $E_1 + E_2 = \sqrt{s}$ wird das Endergebnis erhalten:

$$R_2(P^{\mu}, M_1, M_2) = \frac{1}{4} \int \frac{\mathrm{d}\Omega_{d-1}}{(2\pi)^{d-1}} \frac{p^{d-2}}{\sqrt{s}} \quad . \tag{2.74}$$

Für d=2 ergibt sich dann der on-shell Zweiteilchenphasenraum zu:

$$R_2(P^{\mu}, M_1, M_2) = \frac{1}{8\pi} \int_0^{2\pi} \mathrm{d}\phi \frac{1}{\sqrt{s}} = \frac{1}{4\sqrt{s}} \quad . \tag{2.75}$$

Dreiteilchenphasenraum

Für die Berechnung des Dreiteilchenphasenraums wird die Rekursionsformel aus Gleichung (2.59) verwendet.

$$R_{3}(\sqrt{s}, M_{1}, M_{2}, M_{3}) = \int_{0}^{\sqrt{s}} \frac{d\omega_{3}}{2\pi} \int \frac{d^{2}p}{(2\pi)^{2}} \int_{0}^{\sqrt{s}-\omega_{3}} \frac{d\omega_{2}}{2\pi} \int \frac{d^{2}p}{(2\pi)^{2}} A(\omega_{3}, \mathbf{p}_{3}) A(\omega_{2}, \mathbf{p}_{2}) \times A(\sqrt{s}-\omega_{2}-\omega_{3}, -(\mathbf{p}_{2}+\mathbf{p}_{3}))$$
(2.76)

Um eine Abhängigkeit des Winkels zwischen den beiden Impulsen \mathbf{p}_2 und \mathbf{p}_3 zu erhalten, werden der Schwerpunkts- $\mathbf{Q} = (\mathbf{p}_2 + \mathbf{p}_3)/2$ und der Relativimpuls $\mathbf{q} = \mathbf{p}_2 - \mathbf{p}_3$ eingeführt und ausgenutzt, dass die Spektralfunktionen nur von den Quadraten der Impulse

Kapitel 2 | THEORETISCHE EINFÜHRUNG

abhängen.

$$R_{3}(\sqrt{s}, M_{1}, M_{2}, M_{3}) = \frac{1}{(2\pi)^{6}} \int_{0}^{\sqrt{s}} d\omega_{3} \int_{0}^{\sqrt{s}-\omega_{3}} d\omega_{2} \int d^{2}Q \, d^{2}q \times A(\omega_{3}, \mathbf{Q} - \mathbf{q}/2) A(\omega_{2}, \mathbf{Q} + \mathbf{q}/2) A(\omega_{1}, -2\mathbf{Q}) = \frac{1}{(2\pi)^{6}} \int_{0}^{\sqrt{s}} d\omega_{3} \int_{0}^{\sqrt{s}-\omega_{3}} d\omega_{2} \int d^{2}Q \, d^{2}q \times A(\omega_{3}, \mathbf{Q}^{2} - \mathbf{q} \cdot \mathbf{Q} + \mathbf{q}^{2}/4) A(\omega_{2}, \mathbf{Q}^{2} + \mathbf{Q} \cdot \mathbf{q} + \mathbf{q}^{2}/4) A(\omega_{1}, 4\mathbf{Q}^{2}) = \frac{1}{(2\pi)^{5}} \int_{0}^{\sqrt{s}} d\omega_{3} \int_{0}^{\sqrt{s}-\omega_{3}} d\omega_{2} \int_{0}^{\infty} dQ \, dq \int_{0}^{2\pi} d\varphi \, q \, Q \times A(\omega_{3}, Q^{2} - qQ \cos(\varphi) + q^{2}/4) A(\omega_{2}, Q^{2} + Qq \cos(\varphi) + q^{2}/4) \times A(\sqrt{s} - \omega_{2} - \omega_{3}, 4Q^{2}) \quad .$$

$$(2.77)$$

Dieses Integral wurde numerisch mit den gleichen Grenzen und Schrittweiten in der invarianten Masse \sqrt{s} und der spektralen Breite γ ausgewertet und ebenfalls als Array in den Code eingespeist. Der Dreiteilchenphasenraum R_3 ist in Abb. 2.4 als Funktion von \sqrt{s} und γ illustriert. Auch hier sind bei kleinen Breiten und großen invarianten Massen



Abb. 2.4 – Off-shell Dreiteilchenphasenraum für drei Teilchen mit einer Polmasse von 1 GeV in Abhängigkeit von der spektralen Breite γ und der invarianten Masse \sqrt{s} .

irreguläre Strukturen erkennbar. Diese Strukturen treten jedoch nur bei sehr kleinen Breiten auf, welche in dieser Arbeit nicht untersucht werden und in guter Näherung durch die on-shell Funktion ersetzt werden können.

2.3 Numerische Implementierung

Für die numerische Implementierung wird für die Phasenraumdichte der Testteilchen-Ansatz gewählt. Wegen der off-shell Dynamik ist die Energie ein weiterer Freiheitsgrad, aber anstatt die Energie unabhängig von dem Impuls zeitlich zu ändern, wird in dieser Arbeit die Masse der Testteilchen entsprechend ihrer Spektralfunktionen bei Stößen verändert. Die Energie ergibt sich weiterhin über $E = \sqrt{\mathbf{p}^2 + m^2}$. Die Phasenraumdichte in dem Testteilchen-Ansatz (2.50) wird um die Deltafunktion in der Masse, bzw. der Energie erweitert. Damit ergibt sich

$$F(x,\mathbf{p},m) = \frac{(2\pi)^3}{num} \sum_{i=1}^{num \cdot N} \frac{1}{\omega} \delta^2(\mathbf{x} - \mathbf{x}_i(t)) \delta^2(\mathbf{p} - \mathbf{p}_i(t)) \delta(\omega - E_i(t)) \quad , \qquad (2.78)$$

wobei die Vorfaktoren entsprechend der Normierung

$$\int \frac{\mathrm{d}^2 x \,\mathrm{d}^2 p \,\mathrm{d}\omega}{(2\pi)^3} \omega \underbrace{A(x, \mathbf{p}, \omega) f(x, \mathbf{p})}_{F(x, p)} = N \tag{2.79}$$

gewählt sind. Die N Testteilchen der num parallel simulierten Systeme bilden gemeinsam die Greensfunktion $G^{<}$. Die Berechnungen finden innerhalb einer Box mit Volumen $V = 18^2 \text{ fm}^2$ und periodischen Randbedingungen statt und simulieren einen unendlich großen homogen gefüllten Raum. Die Größe der Box muss so gewählt werden, dass Randeffekte keinen Einfluss auf die Ergebnisse haben. Innerhalb dieser Box wird über die In-Cell Methode entschieden, welche Reaktionen innerhalb eines Zeitschritts stattfinden. In der In-Cell Methode wird das Volumen, in der die Berechnungen stattfinden, in mehrere Unterzellen aufgeteilt, siehe Abb. 2.5. Die Wahl der Größe einer solchen Zelle ΔV ist abhängig von der Anzahl der Teilchen und der Homogenität innerhalb einer solchen Zelle. Als Bedingung sollten in jeder Zelle genügend Teilchen vorhanden sein, sodass sich keine starken Gradienten ausbilden und genügend Wechselwirkungspartner zur Verfügung stehen. Aus diesen Gründen sind für die Anwendung höhere Dichten optimal. Innerhalb einer Zelle kann jedes Teilchen mit jedem anderen Teilchen wechselwirken, weshalb eine Zelle für eine realistische Beschreibung nicht zu groß gewählt werden sollte.

Die Wahl der eintretenden Wechselwirkungen erfolgt über die Reaktionswahrscheinlich-



Abb. 2.5 – Beispiel für das endliche Volumen V mit 8×8 Zellen vom Volumen $\Delta V = \Delta x \Delta y$. Die diskreten Punkte stehen für eine Initialisierung im Ortsraum über Monte-Carlo.

keiten, die in dem Code nach Gleichung (2.61) berechnet werden. Nachdem alle Reaktionswahrscheinlichkeiten für die $1 \rightarrow 3, 2 \rightarrow 2$ und $3 \rightarrow 1$ Reaktionen mit den entsprechenden ausgehenden Impulsen und Massen errechnet wurden, wird per Monte-Carlo entschieden welche Reaktionen stattfinden. Die ausgehenden Impulse und Massen werden im CMS anhand der Faltung der Spektralfunktionen mit dem entsprechenden Phasenraum ebenfalls per Monte-Carlo ausgewählt und im Anschluss in das "Laborsystem"rücktransformiert, in welchem der Gesamtimpuls aller Teilchen verschwindet. Die Wahl der Reaktion eines jeden Teilchens erfolgt nach dem folgenden Prinzip:

• Teste per Monte-Carlo, ob eine Reaktion eintreten kann:

Konkret wird überprüft ob eine Zufallszahl zwischen 0 und 1 größer als $\exp(-P_{\text{tot}})$, mit $P_{\text{tot}} = P_{1\to3} + P_{2\to2} + P_{3\to1}$ und $P_{n\to m} = \sum p_{n\to m}$, ist. p bezeichnet in diesem Fall die Wahrscheinlichkeit einer Reaktion und P die Gesamtwahrscheinlichkeit eines Reaktionstyps. Die Exponentialfunktion entspricht der "Überlebenswahrscheinlichkeit" eines freien Teilchens.

• Überprüfe via Monte-Carlo welcher Reaktionstyp stattfindet:

Hierzu wird eine Zufallszahl zwischen 0 und P_{tot} gewürfelt; ist diese Zahl kleiner gleich $P_{1\to3}$ wird eine $1 \to 3$ Reaktion stattfinden. Liegt die Zahl in dem Bereich $(P_{1\to3}, P_{1\to3} + P_{2\to2}]$ dann wird eine $2 \to 2$ Reaktion eintreten. Ansonsten wird eine

 $3 \rightarrow 1$ Reaktion realisiert.

• Bestimme welche der Reaktionen des Typs $n \to m$ eintritt:

In diesem Schritt wird erneut über Monte-Carlo eine zufällige Reaktion aus den vorab berechneten individuellen Reaktionen ausgewählt. Im Anschluss wird die entsprechende Reaktionswahrscheinlichkeit auf 0 gesetzt und bei den teilgenommenen Teilchen vermerkt, dass sie in diesem Zeitschritt $[t, t + \Delta t]$ bereits wechselwirkten.

Der Vermerk einer Teilchenwechselwirkung ist nötig, da hier nur einfache Stöße betrachtet werden (Born'sche Näherung), was bei der Wahl der Zeitschrittweite Δt ebenfalls in Betracht gezogen werden muss. Ist die Zeitschrittweite zu groß, so werden zu viele Reaktionen, die bei einer kleineren Zeitschrittweite aufgelöst werden könnten, verpasst, was eine korrekte Beschreibung nicht zulässt. Die Zeitschrittweite Δt besitzt einen direkten Einfluss auf den Wert der Wahrscheinlichkeit einer jeden Reaktion, wie Gleichung (2.61) entnommen werden kann. Durch Anpassen der Zeitschrittweite Δt werden unphysikalische Reaktionswahrscheinlichkeiten größer 1 vermieden sowie Zeitintervalle, in denen keine Reaktionen stattfinden, minimiert.

Kapitel 3

Transportsimulation in 2+1 Dimensionen

In diesem Kapitel wird auf die Ergebnisse der Simulation der skalaren ϕ^4 -Theorie innerhalb eines Volumens V mit periodischen Randbedingungen eingegangen. Die Untersuchungen finden für zwei verschiedene Dichten, $\rho_1 = 4 \text{ fm}^{-2}$ und $\rho_2 = 5 \text{ fm}^{-2}$, sowie je zwei unterschiedliche anfängliche Impulsraumverteilungen, V1 und V2, bei Kopplungsstärken $\lambda = 14 \,\text{GeV}$ und $18 \,\text{GeV}$ statt. Die Verteilungen V1 und V2 initialisieren das System weit außerhalb des Gleichgewichtszustands, wodurch die Äquilibrierung der Systeme studiert werden kann. In den Berechnungen werden jegliche Counter-Terme vernachlässigt, weshalb die Polmasse m der Spektralfunktionen der Masse aus der ϕ^4 -Lagrangedichte entspricht und in allen transporttheoretischen Berechnungen 1 GeV beträgt. Dadurch, dass der transporttheoretische Ansatz zur Untersuchung der Nichtgleichgewichtsdynamik des Systems aus skalaren Bosonen vollkommen off-shell formuliert ist, kann auch die Spektralfunktion des Systems zu allen Zeiten (auf dem diskreten Zeitgitter) berechnet werden. Zunächst werden die Ergebnisse bei einer Kopplungskonstanten $\lambda = 14 \,\mathrm{GeV}$ präsentiert, worauf die Ergebnisse für $\lambda = 18 \,\text{GeV}$ folgen. Nach einer Diskussion der erzielten Erkenntnisse über den Transportansatz folgt ein Vergleich mit den Lösungen der KB Gleichungen (2.29,2.30) unter Verwendung der 2PI Diagramme in zweiter Ordnung der Kopplungskonstanten λ .

3.1 Kopplung $\lambda = 14 \, \text{GeV}$

In den Berechnungen beträgt das Volumen den Wert $V = 18^2 \text{ fm}^2$, wobei in Anhang B überprüft wurde, ob eine Vergrößerung des Volumens um etwa einen Faktor 4 einen

Kapitel 3 TRANSPORTSIMULATION IN 2+1 DIMENSIONEN

merklichen Einfluss auf die Ergebnisse hat. Es stellte sich heraus, dass ein vergrößertes Volumen einen Einfluss auf kurzfristige Prozesse besitzt, aber die zeitliche Entwicklung des Systems nicht verändert, die hier von primären Interesse ist.

Die anfänglichen Impulsraumverteilungen V1 und V2 sind exemplarisch in Abb. 3.1 als



Abb. 3.1 – Impulsraumverteilung $n(\mathbf{p})$ der Anfangsverteilungen V1 und V2 zum Zeitpunkt t=0 für das System der Dichte ρ_1 . Beide Verteilungen entsprechen derselben Energiedichte.

Funktion von p_x und p_y dargestellt. Die Verteilungen V1 und V2 sind so gewählt, dass sie dieselbe Energiedichte reproduzieren; es ist jedoch wegen der Initialisierung per Monte-Carlo eine Abweichung der Energiedichten von etwa 1% für num = 300 vorhanden. Beide Verteilungen initialisieren das System weitab vom Gleichgewicht. Für die Dichte ρ_2 ist die Form der Impulsraumverteilung $n(\mathbf{p})$ qualitativ identisch zu der in Abb. 3.1, die Werte liegen nur entsprechend der größeren Dichte höher. Beide Initialisierungen V1 und V2 sind entlang der p_x -Achse aufgrund der Inhomogenität ausgezeichnet, weshalb im Impulsraum ein "Quadrupolmoment" Q bezüglich dieser Achse bestimmt werden kann:

$$Q(t) = \frac{\int d^2 p \ (p_x^2 - p_y^2) n(\mathbf{p}, t)}{\int d^2 p \ n(\mathbf{p}, t)} = \frac{\int d^2 p \ (p_x^2 - p_y^2) n(\mathbf{p}, t)}{\rho(t)} \quad .$$
(3.1)

Das Verschwinden des Quadrupolmoments Q der Impulsraumverteilung $n(\mathbf{p})$ liefert Informationen über die Dauer der kinetischen Äquilibrierung in Abhängigkeit der Kopplungsstärke λ , der Dichte ρ und der Verteilungen V1, V2. Unter kinetischer Äquilibrierung ist die Propagation des Systems in einen Zustand zu verstehen, in dem die Impulsraumverteilung $n(\mathbf{p})$ eine Gleichgewichtsform annimmt. In dem in dieser Arbeit behandelten Fall muss die Impulsraumverteilung im Gleichgewicht der Bose-Einstein Statistik genügen, da es sich um skalare Bosonen handelt. Die Bose-Einstein Statistik ist nur vom Betrag des Impulses $|\mathbf{p}|$ abhängig:

$$n(\mathbf{p}) = \frac{1}{\exp((\sqrt{|\mathbf{p}|^2 + m^2} - \mu)/T) - 1} \quad , \tag{3.2}$$

mit T der Temperatur und μ dem chemischen Potential des Systems. Das chemische Potential μ muss im Gleichgewichtszustand verschwinden, besitzt jedoch zunächst (je nach Anfangsverteilung) einen endlichen Wert. Da die Gleichgewichtsform der Impulsraumverteilung rotationssymmetrisch (in zwei räumlichen Dimensionen: polarsymmetrisch) ist, muss das Quadrupolmoment Q bei Erreichen des kinetischen Gleichgewichts nach Definition (3.1) verschwinden. Je eher das Quadrupolmoment gegen Null strebt desto schneller geht die kinetische Äquilibrierung vonstatten. Zu diesem Zweck sind die Quadrupolmomente für die Systeme der Dichten ρ_1 , ρ_2 und beiden Verteilungen in Abb. 3.2 für die Kopplungsstärken $\lambda/\text{GeV}= 14$ und 18 für einen direkten Vergleich der Kopplungsstärken dargestellt. Alle Quadrupolmomente zeigen einen exponentiellen Abfall inner-



Abb. 3.2 – Quadrupolmoment Q in Abhängigkeit der Zeit t. Links befindet sich der zeitliche Verlauf für die Kopplungskonstante $\lambda = 14 \text{ GeV}$ und rechts für $\lambda = 18 \text{ GeV}$. Das Quadrupolmoment zeigt einen exponentiellen Abfall, dessen Abklingkonstante τ stark von der Kopplungsstärke λ abhängt.

halb des angegebenen Zeitbereichs, außerhalb dieses Bereichs treten größere statistische Fluktuationen auf. Die Stärke des Abfalls des Quadrupolmoments Q der Impulsverteilung hängt primär von der Wahl der Kopplungskonstanten λ ab, an zweiter Stelle von der Dichte ρ und an letzter Stelle von der Anfangsverteilung. Wegen des exponentiellen Abfalls wurden die Quadrupolmomente über die Funktion

$$Q_{\rm fit}(A,\tau,t) = A \exp(-t/\tau) \tag{3.3}$$

Kapitel 3 TRANSPORTSIMULATION IN 2+1 DIMENSIONEN

gefittet, wobei lediglich die Abklingkonstante τ von Interesse ist. Die Werte der Abklingkonstanten geben Informationen über die Zeitskala der kinetischen Äquilibrierung an und sind in Tab. 3.1 zusammengefasst. Die kinetische Äquilibrierung erfolgt bei Ver-

Tab. 3.1 – Abklingkonstanten der Quadrupol
momente innerhalb des transport
theoretischen Ansatzes.

$\lambda = 14 {\rm GeV}$	$\rho \; [{\rm fm}^{-2}]$	V	τ [fm]	$\lambda = 18{\rm GeV}$	$\rho \; [\rm{fm}^{-2}]$	V	$\tau ~[{\rm fm/c}]$
	4	1	12.9		4	1	7.7
	4	2	12.7		4	2	7.5
	5	1	11.6		5	1	6.4
	5	2	11.2		5	2	6.0

größerung der Kopplungsstärke λ von 14 GeV auf 18 GeV etwa doppelt so schnell. Bei einer ähnlich großen Steigerung der Dichte ρ von $4 \,\mathrm{fm}^{-2}$ auf $5 \,\mathrm{fm}^{-2}$ treten unabhängig von der Kopplungsstärke Änderungen der Abklingkonstanten τ von etwa 1.4 fm/c auf. Eine konkrete Abhängigkeit von der Anfangsverteilung kann weitestgehend ausgeschlossen werden, da sich hier nur geringfügige Änderungen in τ zeigen, die im Bereich der statistischen Ungenauigkeiten liegen.

Die explizite zeitliche Entwicklung der Impulsraumverteilung $n(\mathbf{p})$ ist in Abb. 3.3 exemplarisch für die Dichte ρ_1 , die Anfangsverteilung V1 und der Kopplungskonstante $\lambda = 14 \text{ GeV}$ bei $p_y = 0 \text{ GeV}$ dargestellt. Die Impulsraumverteilung nimmt zunächst in der relativ kurzen kinetischen Phase eine Form an, die bereits durch die Bose-Einstein-Statistik unter Berücksichtigung eines chemischen Potentials beschrieben werden kann. Die Impulsraumverteilung beginnt dann zeitlich zu schrumpfen, was durch die chemische Äquilibrierung hervorgerufen wird. In der skalaren ϕ^4 -Theorie muss das chemische Potential μ im Gleichgewichtszustand verschwinden. Zur Überprüfung, ob sich das System in den korrekten Gleichgewichtszustand begibt, ist in Abb. 3.4 die zeitliche Entwicklung des chemischen Potentials μ und der Temperatur T für die Kopplungskonstante $\lambda = 14 \text{ GeV}$ illustriert, welche durch den Fit der Impulsraumverteilung über die Funktion:

$$n_{\rm fit}(\mathbf{p},\mu,T) = \frac{1}{\exp((\sqrt{\mathbf{p}^2 + m^2} - \mu)/T) - 1} \quad , \tag{3.4}$$

gewonnen werden. Es stellt sich heraus, dass das chemische Potential aufgrund der $3 \rightarrow 1$ und $1 \rightarrow 3$ Reaktionen wie erwartet zu Beginn abfällt, dann jedoch einen konstanten endlichen Wert annimmt. Der Wert beträgt für ρ_1 in etwa 0.41 GeV und für ρ_2 0.45 GeV. Damit beschreibt der verwendete Transportansatz das System in dieser Hinsicht nicht



Abb. 3.3 – Zeitliche Entwicklung der Impulsraumverteilung $n(\mathbf{p}, t)$ für $p_y = 0$ GeV. Wegen der Spiegelsymmetrie am Ursprung entlang der p_x -Achse ist nur der positive Achsenabschnitt gezeigt.

vollständig.

Die Temperatur T ändert sich in dem betrachteten Zeitraum nur geringfügig, steigt jedoch zunächst mit der Zeit als Konsequenz der abfallenden Teilchenzahl N leicht an (erkenntlich an der insgesamt abfallenden Impulsraumverteilung). Die geschätzten Grenzwerte der Temperatur betragen für ρ_1 etwa 0.77 GeV und für die Teilchendichte $\rho_2 \approx 0.74 \text{ GeV}$. Insgesamt benötigt die chemische Äquilibrierung eine deutlich längere Zeit als die kinetische Äquilibrierung. Für die Berechnung des Systems in der Phasenraumsimulation bis in ein stabiles chemisches Gleichgewicht wird eine sehr hohe Statistik benötigt, die eine weit höhere Rechenzeit beanspruchen würde. Der Trend zeigt jedoch, dass der Gleichgewichtszustand bei endlichem *num* ein nicht verschwindendes chemisches Potential μ besitzt und somit den theoretischen Erwartungen widerspricht.

Der Weg zur chemischen Äquilibrierung ist allein durch die off-shell 1 \leftrightarrow 3 Reaktionen möglich, welche beispielsweise durch die Boltzmann Gleichung nicht berücksichtigt werden. Die Änderung der Teilchendichte ρ , als Konsequenz der 1 \leftrightarrow 3 Reaktionen, ist in Abb. 3.5 dargestellt. Zu Beginn der Untersuchung steigt die Teilchenzahl wegen der dominierenden 1 \rightarrow 3 Reaktionen stark an, geht dann aber langsam fallend gegen einen Grenzwert. Der Gleichgewichtswert der Teilchendichte ρ unterscheidet sich für die verschiedenen Anfangsverteilungen und liegt für $\lambda = 14 \text{ GeV}$ unter der Anfangsdichte von 4 fm^{-2} , bzw. 5 fm⁻². Explizite Darstellungen der 1 \rightarrow 3, 2 \rightarrow 2 und 3 \rightarrow 1 Reaktionsra-



Abb. 3.4 – Zeitliche Entwicklung des chemischen Potentials μ (links) und der Temperatur T (rechts) für vier Systeme bei einer Kopplungsstärke von $\lambda = 14 \text{ GeV}$.



Abb. 3.5 – Teilchendichte ρ in Abhängigkeit der Zeit für die Anfangsverteilungen V1 und V2. An linker Stelle ist die zeitliche Entwicklung des Systems mit der anfänglichen Teilchendichte $\rho_1 = 4 \text{ fm}^{-2}$ und an rechter Stelle mit der anfänglichen Teilchendichte $\rho_2 = 5 \text{ fm}^{-2}$ dargestellt.

ten R in Abhängigkeit der Zeit t befinden sich exemplarisch für das System (ρ_1 ,V1) in Abb. 3.6.

Für die 1 \leftrightarrow 3 Reaktionen ist die spektrale Breite $\gamma_{\rm sys}$ des Systems äußerst relevant, da eine zu geringe Breite die Auswahl passender Massen und Impulse für die 1 \leftrightarrow 3 Reaktionen unwahrscheinlich werden lässt. Die Auswahl der Massen und Impulse einer jeden Reaktion erfolgt wie in Abschnitt 2.3 beschrieben über die Faltung der Spektralfunktionen mit dem entsprechenden Phasenraum und der Erfolg der Zufallswahl ist direkt an die Breite der Spektralfunktionen gekoppelt, welche in jedem Zeitschritt t dem Mittel von $\gamma_{\rm sys}$ über die 20 vorhergehenden Zeitschritte entspricht. Die spektrale Breite des Systems $\gamma_{\rm sys}$ berechnet sich aus der Gesamtreaktionsrate R, in der die 1 \leftrightarrow 3 und 2 \leftrightarrow 2



Abb. 3.6 – Zeitlicher Verlauf von den Reaktionsraten R der $1 \rightarrow 3$, $2 \rightarrow 2$ und $3 \rightarrow 1$ Reaktionen.

Reaktionsraten zusammengefasst sind, nach:

$$\gamma_{\rm sys} = \frac{R\,\hbar c}{N} \quad , \tag{3.5}$$

wobei der Faktor $\hbar c$ für die korrekte Einheit (Energie) der spektralen Breite sorgt. Der zeitliche Verlauf der spektralen Breite der vier Systeme mit der Kopplungskonstanten $\lambda = 14 \text{ GeV}$ findet sich in Abb. 3.7. Ähnlich wie die Teilchendichten steigt die spektrale



Abb. 3.7 – Zeitlicher Verlauf der spektralen Breite des Systems für die Dichten ρ_1 , ρ_2 und die Anfangsverteilungen V1, V2.

Breite des Systems zu Beginn stark an, flacht dann aber gegen einen Gleichgewichtswert

Kapitel 3 TRANSPORTSIMULATION IN 2+1 DIMENSIONEN

ab. Der starke Anstieg in der Breite sowie der Teilchendichte, bzw. der Reaktionsrate $1 \rightarrow 3$ wird dadurch hervorgerufen, dass das System bei Initialisierung sehr fern vom Gleichgewicht ist und die Reaktionen zum Zeitpunkt t = 0 fm/c eingeschaltet werden. Der Gleichgewichtswert der spektralen Breite ist nur von der Wahl der Anfangsdichte abhängig und beträgt für ρ_1 etwa 0.132 GeV und für ρ_2 etwa 0.153 GeV.

Da alle Berechnungen vollkommen off-shell erfolgen wird hier, wie auch bei Lösung der KB Gleichungen, Zugang zu den Spektralfunktionen erhalten. Zur Berechnung der Spektralfunktion $A(\omega, \mathbf{p})$ wird im Transportansatz die Normierung der Phasenraumdichte $F(\omega, \mathbf{p})$ genutzt:

$$\frac{V}{(\hbar c)^2} \int_0^\infty \frac{\mathrm{d}\omega}{2\pi} \int_{-\infty}^\infty \frac{\mathrm{d}^2 p}{(2\pi)^2} \ 2\omega A(\omega, \mathbf{p}) n(\mathbf{p}) = N \quad . \tag{3.6}$$

Nach Diskretisierung der Impulse über $\Delta p = \Delta p_x = \Delta p_y = 0.4 \,\text{GeV}$ und der Energie $\Delta \omega = 0.06 \,\text{GeV}$ ergibt sich die Spektralfunktion für ω_i und \mathbf{p}_i zu

$$A(\omega_i, \mathbf{p}_i) = \frac{N(\omega_i, \mathbf{p}_i)(2\pi)^3(\hbar c)^2}{2\omega_i V n(\mathbf{p}_i)\Delta\omega(\Delta p)^2} \quad , \tag{3.7}$$

mit K_i dem Intervall $[(i - 1/2)\Delta K, (i + 1/2)\Delta K)$ (K stellvertretend für ω oder **p**). Exemplarisch ist in Abb. 3.8 die Spektralfunktion $A(\omega, \mathbf{p})$ des Systems mit der Dichte ρ_1 und der Anfangsverteilung V1 zum Zeitpunkt t = 138.6 fm/c in Abhängigkeit des Impulses $\mathbf{p} = (p_x, 0 \text{ GeV})$ und der Energie ω dargestellt. Die Spektralfunktionen der anderen Systeme sehen Abb. 3.8 ähnlich, es weichen lediglich die Breiten der Spektralfunktionen der "Peak" bei kleinen Energien in der Nullmode des Impulses und damit die Häufung bei kleinen Massen. Solche "Peaks" treten in der vollen KB Theorie nicht auf, wie in Abschnitt 3.3 gezeigt wird. Diese kleinen Massen sind Resultate der $1 \rightarrow 3$ Reaktionen, welche für diese Massen mit einer geringen Wahrscheinlichkeit numerisch akzeptiert werden. Des Weiteren werden die spektralen Breiten zu höheren Impulsmoden hin geringer. Das zackige Aussehen bei vor allem größeren Impulsen ist ein Produkt der statistischen Fluktuationen, da in den Berechnungen num = 300 gesetzt wurde.

Durch den Fit der errechneten Spektralfunktionen mit der relativistischen Breit-Wigner Funktion (2.63) können die spektralen Breiten γ für einzelne Impulse zu jedem Zeitpunkt bestimmt und so deren zeitliche Entwicklung beobachtet werden. In Abb. 3.9 sind die spektralen Breiten einiger Impulse (p_x /GeV= 0.0, 0.4, 0.8, 1.2, 2.4) des Systems mit



Abb. 3.8 – Spektralfunktion $A(\omega, p_x, 0 \text{ GeV})$ des Systems mit der Dichte ρ_1 , der Verteilung V1 und der Kopplungskonstanten $\lambda = 14 \text{ GeV}$ zum Zeitpunkt t = 138.6 fm/c.

der Teilchendichte ρ_1 und Anfangsverteilung V1 angegeben. Mit Hilfe der Fits ist nun deutlich erkennbar, dass die Breiten zu höheren Impulsen hin schrumpfen. Bei weiterer Betrachtung fällt auf, dass die spektralen Breiten der niedrigsten Impulse mit der Systembreite γ_{sys} weitestgehend übereinstimmen. Ebenfalls wie die Systembreite γ_{sys} werden die spektralen Breiten mit der Zeit kleiner, die spektrale Breite der höheren Impulse ändert sich jedoch zeitlich nicht so stark wie die Breite der niedrigsten Impulse.



Abb. 3.9 – Spektrale Breite in Abhängigkeit der Zeit für einige Impulse p_x des Systems $(\rho_1, V1)$.

3.2 Kopplung $\lambda = 18 \, \text{GeV}$

In diesem Abschnitt wird die Äquilibrierung der vier Systeme (ρ_1 , ρ_2 , V1, V2) bei der Kopplung $\lambda = 18 \,\text{GeV}$ untersucht. Die Veränderung der Abklingkonstante τ des Quadrupolmoments Q wurde bereits im vorhergehenden Abschnitt präsentiert. Eine Zusammenstellung der für die Äquilibrierung signifikantesten Größen ist in Abb. 3.10 gegeben. Wegen der vergrößerten Kopplungskonstante musste die Zeitschrittweite Δt verkleinert werden, weshalb die Berechnungsdauer eine genaue Aussage über die Gleichgewichtszustände bei geringerer Dichte ρ_1 nicht zulässt. Innerhalb des betrachteten Zeitraums entwickelt sich die spektrale Breite des Systems $\gamma_{\rm sys}$ für die Teilchendichte ρ_1 für beide Verteilungen V1, V2 identisch, bei ρ_2 sind Unterschiede für die Verteilungen zu größeren Zeiten vorhanden. Die spektrale Breite steigt für alle Systeme zeitlich an; eine Annäherung an einen Gleichgewichtszustand ist innerhalb des berechneten Zeitbereichs für ρ_2 zu erkennen, da die Steigung der spektralen Breite allmählich gegen Null abfällt. Für ρ_1 nimmt eine Annäherung an eine Gleichgewichtsbreite mehr Zeit in Anspruch. Die für die Anderung der Teilchenzahl verantwortlichen Reaktionsraten R der $1 \leftrightarrow 3$ Reaktionen sowie die $2 \rightarrow 2$ Reaktionsraten sind für das System höherer Teilchendichte ρ_2 und Anfangsverteilung V1 in Abhängigkeit der Zeit t in Abb. 3.11 dargestellt. Die Reaktionsraten besitzen einen zu der spektralen Breite des Systems γ_{sys} ähnlichen Verlauf; sie steigen zunächst mit der Zeit stark an und flachen bei großen Zeiten gegen einen Gleichgewichtswert ab. Die Reaktionsraten $1 \leftrightarrow 3$ liegen für die Kopplung $\lambda = 18 \,\text{GeV}$ in etwa um einen Faktor 3 über den Reaktionsraten bei $\lambda = 14 \,\text{GeV}$, die $2 \rightarrow 2$ Reaktionsraten sind jedoch für beide Kopplungen etwa gleichgroß.

Das chemische Potential μ steigt im Gegensatz zu der Entwicklung bei $\lambda = 14 \text{ GeV}$ mit der Zeit für alle Systeme am Anfang der Propagation annähernd linear an, geht dann



40



Abb. 3.10 – Zeitliche Entwicklung der spektralen Breite des Systems γ_{sys} , des chemischen Potentials μ und der Teilchendichte ρ für die Systeme der Anfangsdichten ρ_1 , ρ_2 und den Anfangsverteilungen V1, V2 bei einer Kopplungsstärke von $\lambda = 18 \text{ GeV}$.

aber für die Dichte ρ_2 gegen einen konstanten Wert. Der Wert beträgt für beide Verteilungen V1, V2 in etwa 0.8 GeV, was einem doppelt so großen Wert des chemischen Potentials bei der Kopplungskonstanten $\lambda = 14 \text{ GeV}$ entspricht. Die Teilchendichte ρ steigt anders als bei $\lambda = 14 \text{ GeV}$ stetig ohne abfallende Phase gegen die Gleichgewichtsdichte an.

Insgesamt gehen Systeme, die sich weit vom Gleichgewicht befinden, in der Phasenraumsimulation in relativ kurzer Zeit in einen Zustand über in dem die Impulsverteilung $n(\mathbf{p})$ weitestgehend der Bose-Einstein Statistik gehorcht. Wider Erwarten strebt in der darauf folgenden chemischen Äquilibrierung das chemische Potential nicht gegen Null, sondern gegen endliche Werte. Der Grund hierfür liegt in den 1 \leftrightarrow 3-Reaktionen für die das "detailed balance" nicht hinreichend genau erfüllt ist, bzw. innerhalb der verwendeten Statistik die Fluktuationen in den 1 \rightarrow 3-, 3 \rightarrow 1-Raten zu einem endlichen chemischen Potential führen.

3.3 Lösung der Kadanoff-Baym Gleichungen

In diesem Abschnitt werden die Ergebnisse der Lösung der Kadanoff-Baym Gleichungen des Systems aus skalaren Bosonen in der ϕ^4 -Theorie in einem endlichen Volumen V mit dem Transportansatz verglichen. Der Vergleich mit den KB Gleichungen ist ein wichtiger Test des Transportansatzes, da die KB Gleichungen das System in den korrekten Gleichgewichtszustand mit $\mu = 0$ propagieren [17]. Es gibt jedoch einige wichtige Unterschiede zu den in den vorherigen Abschnitten simulierten Systemen:



Abb. 3.11 – Zeitlicher Verlauf der Reaktionsraten $1 \rightarrow 3, 2 \rightarrow 2, 3 \rightarrow 1$ des Systems (ρ_2 ,V1).

- Es werden keine periodischen Randbedingungen für den Ortsraum genutzt; damit ist ein robuster Vergleich der Lösungen nur für $V \to \infty$ möglich.
- Der Phasenraum ist diskret, wohingegen er in den vorangegangenen Abschnitten kontinuierlich war und nur für die Bestimmung des Bose-Enhancements diskretisiert wurde.
- Die zeitliche Propagation für t < 4 fm/c zeigt starke Oszillationen, da hier noch nicht genügend Stützstellen für die Zeitintegration in (2.29) vorhanden sind.

Alle Berechnungen fanden unter Verwendung derselben Anfangsbedingungen der vorangehenden Abschnitte statt, sodass ein direkter Vergleich möglich ist. Aus der Impulsraumverteilung wird zu Beginn des Programms die Greensfunktion über

$$2\omega_p i G^{<}(\mathbf{p}, t_1 = 0, t_2 = 0) = 2n(\mathbf{p}, t = 0) + 1$$
(3.8)

berechnet, mit ω_p als der on-shell Energie. Mit der errechneten Greensfunktion $G^{<}$ wird über Gleichung (2.27) die anfängliche Selbstenergie $\Sigma^{<}$ bestimmt; beide Funktionen sind in Abb. 3.12 als Funktion des Impulses **p** zu finden.

Wir wenden uns zunächst der kinetischen Äquilibrierung zu: Das Quadrupolmoment des Impulsraums zeigt auch in der Lösung der KB Gleichungen einen exponentiellen Abfall. Für einen direkten Vergleich zu dem transporttheoretischen Ansatz ist das Quadrupolmoment Q in demselben Wertebereich in Abb. 3.13 gezeigt. Mit den Lösungen der KB Gleichungen ist der Unterschied der Verteilungen V1 und V2 im Vergleich zur Transportsimulation kaum vorhanden. Die Abklingkonstanten τ aus dem Fit mit Gleichung



Abb. 3.12 – Imaginärteil der Greensfunktion $G^{<}(\mathbf{p}, t = 0)$ und der Imaginärteil der Selbstenergie $\Sigma^{<}(\mathbf{p}, t = 0)$.



Abb. 3.13 – Quadrupolmoment Q der vier Systeme mit ρ_1 , ρ_2 , V1, V2 aus der Lösung der KB Gleichungen. Die linke Abbildung zeigt den Verlauf des Quadrupolmoments bei $\lambda = 14 \text{ GeV}$ und die rechte Abbildung bei $\lambda = 18 \text{ GeV}$.

(3.3) finden sich in Tab. 3.2 wieder.

Die kinetische Äquilibrierung erfolgt für beide Ansätze annähernd gleich schnell. Die Abklingkonstanten τ sind in der KB Theorie um etwa 2 fm/c größer als die des Transportansatzes. Hieraus kann geschlossen werden, dass die kurzfristige Entwicklung des Systems von beiden Methoden in ähnlicher Weise erfolgt, die Transportbeschreibung jedoch kinetisch etwas schneller äquilibriert, was an den zu Beginn dieses Abschnitts genannten Unterschieden liegt.

In Abb. 3.14 befinden sich die effektiven Teilchendichten der vier Systeme bei $\lambda/\text{GeV}=$ 14, 18 zusammen mit den Ergebnissen der Transportgleichung. Zu Beginn springt wegen der geringen Stützstellen in der Zeit die effektive Teilchendichte für alle Systeme auf

Kapitel 3 TRANSPORTSIMULATION IN 2+1 DIMENSIONEN

Tab. 3.2 – Abklingkonstanten der Quadrupol
momente aus der Lösung der KB Gleichungen.

$\rho \; [\mathrm{fm}^{-2}]$	V	$\tau ~[{\rm fm/c}]$	$\lambda = 18{\rm GeV}$	$\rho \; [{\rm fm}^{-2}]$	V	$\tau [{\rm fm/c}]$
4	1	15.7		4	1	9.6
4	2	15.6		4	2	9.6
5	1	13.5		5	1	8.4
5	2	13.4		5	2	8.6
	$ \frac{\rho [\rm{fm}^{-2}]}{4} \\ $	$\begin{array}{c c c} \rho \; [\mathrm{fm}^{-2}] & \mathrm{V} \\ \hline 4 & 1 \\ 4 & 2 \\ 5 & 1 \\ 5 & 2 \\ \end{array}$	$\begin{array}{c c c c c c c c c c c c c c c c c c c $	$\begin{array}{c c c c c c c c c c c c c c c c c c c $	$\begin{array}{c c c c c c c c c c c c c c c c c c c $	$\begin{array}{c c c c c c c c c c c c c c c c c c c $

einen höheren Wert als 4, bzw. 5 fm⁻². Wie in dem Transportansatz für $\lambda = 14 \text{ GeV}$, steigt auch anfänglich die Teilchendichte bis diese für beide Kopplungen λ den Gleichgewichtswert fallend anstrebt, was für $\lambda = 18 \text{ GeV}$ einem zum Transportansatz qualitativ verschiedenen Verhalten entspricht. Die verschiedenen Verteilungen laufen in der KB Theorie alle zusammen, wobei sie im Transport wegen der geringen Statistik etwas auseinander liegen. Für $\lambda = 14 \text{ GeV}$ liegen die Endwerte über denen der Phasenraumsimulation, was sich bei der höheren Kopplung gerade umkehrt. Der quantitative Unterschied, $(\rho_1, \lambda = 18 \text{ GeV})$ ausgeschlossen, beträgt für alle Systeme etwa 10%.

Das chemische Potential μ geht für alle untersuchten Systeme nach Ref. [8] gegen Null. Die konkrete Berechnung der Impulsverteilung $N(\omega, \mathbf{p})$ ist numerisch sehr aufwändig, weshalb in Abb. 3.15 der Fit an einer genäherten Impulsverteilung¹ durchgeführt wurde. Die chemische Äquilibrierung ist in der Phasenraumsimulation mit endlicher Statistik nicht erfüllt. Mögliche Gründe sind ein nicht exakt erfülltes "detailed balance" in den $1 \leftrightarrow 3$ -Reaktionen, was gepaart mit den statistischen Fluktuationen in ein Gleichgewicht bei endlichem chemischen Potential führt. Solche Probleme sind in den KB Gleichungen durch die Verwendung von Selbstenergien, welche durch die selbstkonsistente Berechnung aus den 2PI Diagrammen direkt an die Greensfunktionen gekoppelt sind, nicht existent.

Die Spektralfunktionen, die durch die Lösung der KB Gleichungen erhalten werden, besitzen wegen der begrenzten Basis für die Fouriertransformation in der Relativzeit aus (2.33) oszillierende Anteile, siehe Abb. 3.16. Hier, wie auch im Transportansatz, besitzt die Spektralfunktion für größere Impulsmoden eine geringere Breite γ . Die Spektralfunktionen liegen wegen des Beitrages der retardierten Selbstenergie und den Counter-Termen für alle Impulse bei etwas höheren Energien als in der Transportlösung.

Weil im Transportansatz die spektrale Breite des Systems γ_{sys} relativ gut mit der Breite

¹Die Näherung besteht darin, dass für jede Impulsmode **p** die energetische Lage der effektiven Teilchenzahl dieser Impulsmode über die on-shell Energie bestimmt wurde. Die in Abb. 3.15 dargestellten Werte des chemischen Potentials μ wurden mit 0.07 GeV für $\lambda = 14$ GeV und 0.03 GeV für $\lambda = 18$ GeV addiert, da ansonsten leicht negative Werte für das chemische Potential μ resultieren.



Abb. 3.14 – Effektive Teilchendichte ρ in der KB Theorie und dem Transportansatz. Oben sind die effektiven Teilchendichten für $\lambda = 14 \text{ GeV}$ und unten für $\lambda = 18 \text{ GeV}$ dargestellt.

der Spektralfunktion $A(\omega, \mathbf{p})$ für $\mathbf{p}/\text{GeV} = 0.0, 0.4$ übereinstimmt sind in Abb. 3.17 die zeitlichen Verläufe für die nullten Impulsmoden der Spektralfunktion für die vier Systeme bei $\lambda = 14$ und 18 GeV sowie die Ergebnisse der Phasenraumsimulation für γ_{sys} illustriert. Allen Systemen ist unabhängig von der Verteilung gemein, dass sie für die Teilchendichte ρ gegen denselben Gleichgewichtswert streben. Der Verlauf der on-shell Breiten γ ähnelt dem Verlauf in dem Transportansatz für $\lambda = 14 \text{ GeV}$, nur sind hier keine großen Fluktuationen vorhanden und die Breite ändert sich in der Zeit nicht stark. Der Abstand beider Dichten ist bei $\lambda = 14 \text{ GeV}$ für die zwei Methoden fast identisch, die Werte liegen für die KB Gleichungen im Gleichgewichtszustand etwa um 25% über denen der Phasenraumsimulation. Für $\lambda = 18 \text{ GeV}$ ist die Spanne zwischen den beiden Dichten in der KB Theorie vergleichbar mit $\lambda = 14 \text{ GeV}$, wohingegen sie in der Phasenraumsimulation deutlich wächst. Die gesamte Zeitentwicklung der on-shell Breite γ unterscheidet sich, wie für die Teilchendichte, bei einer Kopplung von $\lambda = 18 \text{ GeV}$ stark von der Zeitentwicklung der Sytembreite γ_{sys} im Transport. Der Transportansatz liegt



Abb. 3.15 – Das chemische Potential μ der genäherten Verteilungsfunktion $N(\omega)$ in der KB Theorie für $\lambda = 14 \text{ GeV}$ auf der linken und $\lambda = 18 \text{ GeV}$ auf der rechten Seite.

hier für die größere Dichte um 0.1 GeV über der KB Theorie. Gründe für die Abweichungen beider Methoden bei vor allem stärkeren Kopplungen sind einerseits die fehlenden periodischen Randbedingungen in der Lösung der KB Gleichungen und andererseits die statistischen Fluktuationen sowie die Vernachlässigung von Countertermen innerhalb des Transportansatzes.



Abb. 3.16 – Links: Spektralfunktion der Lösung der KB Gleichungen für mehrere Impulse **p** des Systems ρ_1 , V1 und $\lambda = 14 \text{ GeV}$ zum Zeitpunkt t = 145 fm/c. Rechts: Zeitlicher Verlauf der on-shell spektralen Breiten γ für verschiedene Impulsmoden der Spektralfunktion.



Abb. 3.17 – Zeitlicher Verlauf der on-shell Breite γ der vier betrachteten Systeme für $\mathbf{p} = 0.0 \,\text{GeV}$ bei $\lambda = 14 \,\text{GeV}$ (links) und $\lambda = 18 \,\text{GeV}$ (rechts) für beide Methoden.

Kapitel 4

Zusammenfassung

In dieser Arbeit wurde erstmals eine off-shell Transportgleichung mit Einbeziehung der Bose-Enhancement-Faktoren zur Untersuchung von Systemen aus skalaren Bosonen, bzw. skalaren Feldern in der ϕ^4 -Theorie in zwei räumlichen Dimensionen numerisch im Phasenraum gelöst. In diesen Transportgleichungen werden im Gegensatz zu der Boltzmann Gleichung die $1 \leftrightarrow 3$ Reaktionen berücksichtigt, wodurch sich die Teilchenzahl im Laufe der Zeit ändert. Das Kollisionsintegral dieser Transportgleichungen beruht auf der "detailed balance" Relation, womit gewährleistet ist, dass sich im Gleichgewichtszustand die Hin- und Rückreaktionen gleichen und das Kollisionsintegral verschwindet. Als Vergleich zu den Ergebnissen dieses Ansatzes dient die Kadanoff-Baym (KB) Theorie, von der in der Literatur bereits bekannt ist, dass sie die ϕ^4 -Theorie in zweiter Ordnung der Kopplungskonstanten λ der Zwei-Teilchen-irreduziblen Diagramme korrekt beschreibt. Durch die konsistente off-shell Formulierung der bosonischen Tranporttheorie sollten die Ergebnisse beider Methoden nicht stark voneinander abweichen. Beide Methoden unterscheiden sich jedoch insofern als dass in der Lösung der KB Gleichungen keine periodischen Randbedingungen implementiert sind und die Lösung der Transportgleichung keine Counterterme beinhaltet.

Die Ergebnisse zeigen, dass beide Methoden bei kurzfristigen Prozessen, wie der kinetischen Äquilibrierung, das System nahezu identisch beschreiben. Dieses Resultat zeigt sich bei Untersuchung des Quadrupolmoments Q der Impulsverteilung, welches durch die Wahl der Anfangsverteilung bedingt ist und dessen exponentielle Abklingkonstanten von der Lösung der KB Gleichungen nur um ein geringes von denen der Phasenraumsimulation abweichen. Für die langfristige Entwicklung der Systeme bis in den chemischen Gleichgewichtszustand kann eine Identität beider Methoden nicht für beliebige Kopplungskonstanten λ gefunden werden.

Kapitel 4 ZUSAMMENFASSUNG

Die Ergebnisse zeigen, dass beide Methoden für die Kopplungsstärke $\lambda = 14 \text{ GeV}$ das System auf ähnliche Weise propagieren. Ein signifikanter Unterschied liegt jedoch in dem nicht verschwindenden chemischen Potential μ des Transportansatzes. Der endliche Wert im "Gleichgewichtszustand" zeigt, dass die 1 \leftrightarrow 3-Reaktionen nicht von Anfang an das passende Verhältnis zueinander besitzen, d.h. dass die diskrete Monte-Carlo Simulation die zugrunde liegende kontinuierliche "detailed balance" Relation nicht hinreichend genau erfüllt. Im späteren Verlauf stimmen jedoch die 1 \leftrightarrow 3 Reaktionsraten innerhalb der statistischen Schwankungen überein und es wird ein Gleichgewicht erreicht. Für $\lambda = 18 \text{ GeV}$ sind die Unterschiede beider Methoden vor allem für größere Dichten sehr stark; die spektralen Breiten unterscheiden sich in diesem Fall um etwa 0.1 GeV und der Verlauf weicht qualitativ stark ab. Der Unterschied liegt primär an den statistischen Fluktuationen in der Phasenraumsimulation und der zu Beginn ungenauen 1 \leftrightarrow 3-Reaktionsraten, wodurch das System eine zu lange Zeit benötigt bis sich die Raten einander anpassen.

Für einen robusten Vergleich der beiden Methoden müssen für die Lösung der KB-Theorie zudem periodische Randbedingungen im Ortsraum eingeführt werden und in dem Transportansatz die Counterterme der KB Theorie implementiert werden. Außerdem müssen die parallel betrachteten Systeme auf einige Tausend erhöht werden, damit die statistischen Fluktuationen stark unterdrückt werden. Vor allem letzteres bedeutet, dass deutlich längere Rechenzeiten in Anspruch genommen werden müssen, welche aktuell für die Teilchendichte $\rho = 5 \text{ fm}^{-2}$ und num = 300 bei Verwendung eines AMD Dual-Core Opteron 2222 CPU @ 3.00 GHz für die Berechnung von 3000 Zeitschritten ca. eine Woche beträgt.

Die Untersuchung kritischer Phänomene wie der Bose-Einstein Kondensation kann mit der Transportmethode nicht ökonomisch betrieben werden, da hier trotz Zeitschrittweitenkontrolle die Reaktionswahrscheinlichkeiten, wegen des Bose-Enhancements, zunehmend gegen 1 streben und die gesamte Numerik im Fall starker Kopplung zusammenbricht. Mit der KB-Theorie können solche Phänomene ebenfalls nicht vollständig simuliert werden, jedoch ist die Numerik hier deutlich stabiler, sodass zumindest Untersuchungen in der Nähe der Bose-Einstein Kondensation durchgeführt werden können. Ein für die Simulationen noch nicht explizit erwähnter Unterschied der KB Theorie zu der Phasenraumsimulation ist die deutlich geringere Rechenzeit in der KB Theorie. Ein weiterer Vorteil der KB Theorie ist, dass in der Phasenraumsimulation die nötige Speicherkapazität und Rechenzeit um ein vielfaches ansteigt, wenn eine größere Dichte oder Statistik gewählt wird, wobei die KB Theorie nur von der Anzahl an Stützstellen in Insgesamt liefern beide Methoden bei nicht zu starker Kopplung vergleichbare Ergebnisse für homogene Systeme, was für den Transportansatz spricht, der ebenfalls für nichthomogene Systeme unter Berücksichtigung von Gradienten der Selbstenergie angewendet werden kann. Aufgrund der deutlich größeren Rechenzeit ist jedoch eine Lösung der KB Gleichung für die Untersuchung räumlich homogener Systeme der Phasenraumsimulation vorzuziehen.

Anhang A

Gradientenentwicklung

In diesem Abschnitt wird die KB Gleichung in zwei räumlichen Dimensionen vollständig Wigner-transformiert. Zu diesem Zweck muss die Wigner-Transformierte der Faltung zweier Funktionen $C(x, y) = A(x, x') \odot B(x', y)$ auf dem CTP berechnet werden. Mit X = (x + y)/2 dem mittleren Raum-Zeitpunkt und P dem Energie-Impulsvektor ergibt sich für C(X, P) nach [10]:

$$\bar{C}(X,P) = \int d^3(x-y) e^{iP_{\mu}(x^{\mu}-y^{\mu})} A(x,x') \odot B(x',y) = e^{-i\Diamond}\bar{A}(X,P)\bar{B}(X,P) \quad , \quad (A.1)$$

mit der auf vier Dimensionen generalisierten Poisson-Klammer,

$$\Diamond\{\bar{A}\}\{\bar{B}\} := \frac{1}{2} \left(\frac{\partial \bar{A}}{\partial X_{\mu}} \frac{\partial \bar{B}}{\partial P^{\mu}} - \frac{\partial \bar{A}}{\partial P_{\mu}} \frac{\partial \bar{B}}{\partial X^{\mu}} \right).$$
(A.2)

Bei Annahme eines räumlich homogenen Systems brauchen Gradiententerme der Ordnung ≥ 2 nicht berücksichtigt zu werden. Für die KB Gleichungen der retardierten/ avancierten Greensfunktion ergibt sich in erster Ordnung der Gradientenentwicklung:

$$-(P^{2}+m^{2})\bar{G}^{R/A}(X,P) = 1 + \bar{G}^{R/A}(X,P)\bar{\Sigma}^{R/A}(X,P) \quad . \tag{A.3}$$

Es können nun noch separat der Real- und Imaginärteil der retardierten/avancierten Greensfunktion sowie der Selbstenergie betrachtet werden. Im Folgenden werden die Abhängigkeiten von der mittleren Raumzeit X und des 3-Impulses P unterdrückt:

$$\bar{G}^{R/A} = \operatorname{Re} \bar{G}^R \mp \frac{i}{2} \bar{A} \qquad \bar{\Sigma}^{R/A} = \operatorname{Re} \bar{\Sigma}^R \mp \frac{i}{2} \bar{\Gamma} \quad ,$$
 (A.4)

53

Kapitel A GRADIENTENENTWICKLUNG

mit \bar{A} der Spektralfunktion und $\bar{\Gamma}$ der spektralen Breite des Systems. Der Zusammenhang der Spektralfunktion \bar{A} zu dem Imaginärteil der retardierten/avancierten Greensfunktion $\bar{G}^{R/A}$ stammt von

$$A(\mathbf{p}, t_1, t_2) = i[G^{\mathrm{R}}(\mathbf{p}, t_1, t_2) - G^{\mathrm{A}}(\mathbf{p}, t_1, t_2)] = -2\mathrm{Im}\,G^{\mathrm{R}}(\mathbf{p}, t_1, t_2) \quad , \tag{A.5}$$

$$G^{\mathrm{R}}(\mathbf{p}, t_1, t_2) = [G^{\mathrm{A}}(\mathbf{p}, t_2, t_1)]^*$$
 (A.6)

Nach Einsetzen der Komposition (A.4) in Gleichung (A.3) wird

$$-(P^2+m^2)(\operatorname{Re}\bar{G}^{\mathrm{R}}\mp\frac{i}{2}\bar{A}) = 1 + \operatorname{Re}\bar{G}^{\mathrm{R}}\operatorname{Re}\bar{\Sigma}^{\mathrm{R}} - \frac{1}{4}\bar{A}\bar{\Gamma}\mp\frac{i}{2}(\bar{A}\operatorname{Re}\bar{\Sigma}^{\mathrm{R}}+\bar{\Gamma}\operatorname{Re}\bar{G}^{\mathrm{R}}) \quad ,$$
(A.7)

erhalten. Der Imaginärteil und Realteil müssen unabhängig voneinander erfüllt sein, woraus sich die zwei Gleichungen

$$-(P^{2} + m^{2} - \operatorname{Re}\bar{\Sigma}^{\mathrm{R}})\operatorname{Re}\bar{G}^{\mathrm{R}} = 1 - \frac{1}{4}\bar{\Gamma}\bar{A}$$
(A.8)

$$(P^2 + m^2 - \operatorname{Re}\bar{\Sigma}^{\mathrm{R}})\bar{A} = \bar{\Gamma}\operatorname{Re}\bar{G}^{\mathrm{R}} \quad , \tag{A.9}$$

ergeben. Nach Auflösen von (A.8) und (A.9) nach $\operatorname{Re}\bar{G}^{\mathbb{R}}$ und \bar{A} wird die Spektralfunktion \bar{A} in erster Ordnung der Gradientenentwicklung gewonnen, welche die Form einer relativistischen Breit-Wigner Funktion besitzt:

$$\bar{A} = \frac{\bar{\Gamma}}{(P^2 - m^2 - \operatorname{Re}\bar{\Sigma}^{\mathrm{R}})^2 + \bar{\Gamma}^2/4} \quad .$$
 (A.10)

Die Identität wird offensichtlich, wenn $\overline{\Gamma} = 4 \omega \gamma$ gesetzt wird mit γ der als der on-shell Spektralbreite und $\omega = p^0$ als der Energie.

Anhang B

Volumenabhängigkeit der Lösung der Tranportgleichung

Zur Sicherstellung, dass das verwendete Volumen V groß genug gewählt wurde, sodass Randeffekte vernachlässigbar sind, wurde die Simulation mit den Parametern $\rho = 1 \, \text{fm}^{-2}$ und $\lambda = 20 \,\text{GeV}$ für die Volumina $V_0 = 18^2 \,\text{fm}^2 V_1 = 38^2 \,\text{fm}^2$ durchgeführt. Als anfängliche Impulsverteilung wurde die Verteilung V1 gewählt. Die Untersuchungen des Volumeneffekts mussten aufgrund des begrenzten Arbeitsspeichers und einer vertretbaren Rechenzeit bei geringerer Teilchendichte ρ durchgeführt werden. Die Anzahl der parallel betrachteten Systeme num beträgt für das kleinere Volumen 1200 und für das größere Volumen 300. Wegen der bei gleicher Kopplungsstärke λ geringeren spektralen Breite musste auch eine stärkere Kopplung gewählt werden. Für die Untersuchung eines Volumeneffekts wird der zeitliche Verlauf des Quadrupolmoments Q, der spektralen Breite γ_{sys} , der Teilchendichte ρ und des chemischen Potentials μ untersucht, siehe Abb. B.1. Trotz des um einen Faktor 4 vergrößerten Volumens sind keine größeren Abweichungen in der Entwicklung des Systems erkennbar. Grobe Abweichungen sind vor allem in der Teilchendichte ρ an dem zu Beginn langsameren Anstieg in dem größeren System zu sehen. Im weiteren Verlauf entwickelt sich dann aber die Teilchendichte zeitlich identisch zu dem kleineren System fort. Der in dem betrachteten Intervall lineare Anstieg in der Teilchendichte stammt von der Wahl der relativ großen Kopplungskonstante $\lambda = 20 \,\text{GeV}$. Damit ist gezeigt, dass das in den numerischen Untersuchungen verwendete Volumen V_0 hinreichend groß gewählt wurde und keine besonderen Volumeneffekte auftreten.

Kapitel B VOLUMENABHÄNGIGKEIT DER LÖSUNG DER TRANPORTGLEICHUNG



Abb. B.1 – Vergleich der zeitlichen Verläufe des Quadrupolmoments Q, der spektralen Breite des Systems γ_{sys} , der Teilchendichte ρ und des chemischen Potentials μ für die Seitenlängen der Box L/fm=18 und 38.

Literaturverzeichnis

- L. Boltzmann. Weitere Studien über das Wärmegleichgewicht unter Gasmolekülen. Wien. Ber., 66:275, 1872.
- [2] A. Vlasov. J. Phys. (USSR), 9:25, 1945.
- [3] E. A. Uehling and G. E. Uhlenbeck. Transport phenomena in einstein-bose and fermi-dirac gases. *Phys. Rev.*, 43:552–561, 1933.
- [4] W. Cassing, V. Metag, U. Mosel, and K. Niita. Production of energetic particles in heavy-ion collisions. *Physics Reports*, 188(6):363 – 449, 1990.
- [5] P.C. Martin and J. Schwinger. Theory of many-particle systems. i. *Phys. Rev.*, 115:1342–1373, 1959.
- [6] L.P. Kadanoff and G. Baym. *Quantum Statistical Mechanics*. Benjamin, New York, 1962.
- [7] G. Baym. Selfconsistent approximation in many body systems. *Phys. Rev.*, 127:1391–1401, 1962.
- [8] S. Juchem, W. Cassing, and C. Greiner. Quantum dynamics and thermalization for out-of-equilibrium phi^{**}4 theory. *Phys.Rev.*, D69:025006, 2004.
- [9] P Danielewicz. Quantum theory of nonequilibrium processes, i. Annals of Physics, 152(2):239 - 304, 1984.
- [10] W. Cassing and S. Juchem. Semiclassical transport of particles with dynamical spectral functions. *Nucl. Phys.*, A665:377–400, 2000.
- [11] A. Hohenegger, A. Kartavtsev, and M. Lindner. Deriving Boltzmann Equations from Kadanoff-Baym Equations in Curved Space-Time. *Phys.Rev.*, D78:085027, 2008.

Kapitel B LITERATURVERZEICHNIS

- [12] J. Knoll, Yu.B. Ivanov, and D.N. Voskresensky. Towards a quantum transport description of particles with finite mass width. 1998.
- [13] P. Danielewicz and G.F. Bertsch. Production of deuterons and pions in a transport model of energetic heavy-ion reactions. *Nuclear Physics A*, 533(4):712 – 748, 1991.
- [14] S.J. Wang, W. Cassing, J.M. Hauser, A. Peter, and M.H. Thoma. Constraint correlation dynamics of SU(N) gauge theories. *Annals Phys.*, 242:235–264, 1995.
- [15] A. Peter, J.M. Hauser, M.H. Thoma, and W. Cassing. Cluster expansion approach to the effective potential in phi^{**}4 in (2+1)-dimensions theory. Z.Phys., C71:515– 524, 1996.
- [16] A. Peter, W. Cassing, J.M. Hauser, and M.H. Thoma. Convergence properties of the cluster expansion for equal time Green functions in scalar theories. Z.Phys., A358:91–100, 1997.
- [17] W. Cassing. From Kadanoff-Baym dynamics to off-shell parton transport. Eur.Phys.J.ST, 168:3–87, 2009.
- [18] R van Leeuwen et al. Introduction to the Keldysh Formalism. Lect. Notes Phys., 706:33–59, 2006.
- [19] M. Bonitz. Quantum kinetic theory. B.G. Teubner Stuttgart, 1998.
- [20] W. Botermans and R. Malfliet. Quantum transport theory of nuclear matter. Phys. Rep., 198:115–194, 1990.
- [21] J. Berges. Controlled nonperturbative dynamics of quantum fields out-ofequilibrium. Nucl. Phys., A699:847–886, 2002.
- [22] Wang S.J. and W Cassing. Explicit treatment of n-body correlations within a density-matrix formalism. Ann. Phys., 159(2):328 – 350, 1985.
- [23] W. Cassing and S.J. Wang. Numerical study of a selfconsistent two-body theory for colliding ions in a one-dimensional model. Z. Phys., A328(4):423–429, 1987.
- [24] W. Cassing. Skript zur Theorie der Thermodynamik. 2013.
- [25] W. Cassing. Anti-baryon production in hot and dense nuclear matter. Nucl. Phys., A700:618–646, 2002.

[26] W. Cassing and S. Juchem. Semiclassical transport of hadrons with dynamical spectral functions in A + A collisions at SIS / AGS energies. *Nucl. Phys.*, A672:417– 445, 2000.

Danksagung

An dieser Stelle möchte ich mich allen vorweg bei Herrn Cassing für die Möglichkeit der Durchführung meiner Masterthesis bedanken. Ich bedanke mich auch für die überaus gute Betreuung während meiner letzten Module des Masters, sowie während meiner Masterthesis selbst. Mein Dank gilt auch meinen Kollegen und Freunden, ohne die meine Pausen und meine Freizeitgestaltung nicht ganz so amüsant geworden wären, und insbesondere Thorsten Steinert, zu dem ich jederzeit mit Fragen bezüglich meiner Arbeit kommen konnte. Ich bedanke mich außerdem bei meiner Familie dafür, dass sie immer für mich da ist.

Zuletzt möchte ich mich bei meiner Freundin Pamela bedanken, die mich seit Mitte des ersten Semesters auf diesem Weg begleitet. Ich danke dir, dass du immer für mich da bist.

Selbstständigkeitserklärung

Hiermit versichere ich, die vorgelegte Thesis selbstständig und ohne unerlaubte fremde Hilfe und nur mit den Hilfen angefertigt zu haben, die ich in der Thesis angegeben habe. Alle Textstellen, die wörtlich oder sinngemäß aus veröffentlichten Schriften entnommen sind, und alle Angaben die auf mündlichen Auskünften beruhen, sind als solche kenntlich gemacht. Bei den von mir durchgeführten und in der Thesis erwähnten Untersuchungen habe ich die Grundsätze gute wissenschaftlicher Praxis, wie sie in der "Satzung der Justus-Liebig-Universität zur Sicherung guter wissenschaftlicher Praxis" niedergelegt sind, eingehalten. Gemäß § 25 Abs. 6 der Allgemeinen Bestimmungen für modularisierte Studiengänge dulde ich eine Überprüfung der Thesis mittels Anti-Plagiatssoftware.

Datum

Unterschrift