

Quantenfeldtheorie II

Prof. A. Wipf

Theoretisch-Physikalisches-Institut

Friedrich-Schiller-Universität, Max Wien Platz 1

07743 Jena

4. Auflage, Sommersemester 2009

Inhaltsverzeichnis

1	Einführung	2
1.1	Literaturempfehlungen:	5
2	Pfadintegrale	7
2.1	Wiederholung der Quantenmechanik	9
2.2	Feynman-Kac Formel	12
2.3	Euklidisches Pfadintegral	15
2.3.1	Quantenmechanik für imaginäre Zeiten	15
2.3.2	Das Pfadintegral für imaginäre Zeiten	19
2.3.3	Pfadintegrale in der statistischen Mechanik	20
2.3.4	Korrelationsfunktionen in der Quantenstatistik	21
2.4	Anhang A: Der harmonische Oszillator	25
2.5	Aufgaben	27
3	Hochdimensionale Integrale	31
3.1	Hochdimensionale Integrale	31
3.1.1	Numerische Algorithmen	32
3.1.2	Monte-Carlo Integration	38
3.2	Important Sampling	44
3.3	Wahrscheinlichkeiten	46
3.4	Programme für Kapitel 3	50
3.5	Aufgaben	53
4	Simulationen	55
4.1	Markovprozesse	55
4.2	Detailliertes Gleichgewicht	61
4.2.1	Akzeptanzrate	61
4.2.2	Hasting und Metropolis Methode	62
4.2.3	Wärmebad-Methode	65
4.3	Anharmonischer Oszillator	67

4.4	Hybrid-Monte-Carlo Algorithmus	72
4.4.1	HMC für den anharmonischen Oszillator	76
4.5	Programme zu Kapitel 4	77
4.5.1	Headerdateien	78
4.6	Aufgaben	80
5	Reelles Skalarfeld	81
5.1	Quantisierung des Skalarfelds	82
5.1.1	Das freie Feld bei endlichen Temperaturen	85
5.2	Schwingerfunktion und effektives Potential	89
5.2.1	Die Legendre-Transformation	91
5.3	Skalares Gitterfeld	95
5.4	2-Punktfunktion als Wegintegral	100
5.5	Zur Leibniz-Regel auf dem Gitter	102
5.6	Programme zu Kapitel 9	103
5.7	Aufgaben	104
6	Klassische Spinmodelle	105
6.1	Isingartige Spinmodelle	105
6.2	Beispiele von Spinsystemen	107
6.3	Spinsysteme im Gleichgewicht	111
6.4	Variationsprinzipien	114
6.5	Aufgaben	117
7	Molekularfeldnäherung	118
7.1	MFA für Spinmodelle	118
7.1.1	MFA für das Isingmodell	120
7.2	MFA für Gitterfeldtheorien	127
7.3	Programme zu Kapitel 7	131
7.4	Aufgaben	132
8	Transfermatrizen	134
8.1	Ising-Kette	134
8.1.1	Der „Hamilton-Operator“	138
8.1.2	Die anti-ferromagnetische Kette	139
8.2	Potts-kette	140
8.3	Der allgemeine Formalismus	141
8.3.1	Transfermatrix für reelles Skalarfeld	144
8.3.2	Satz von Frobenius	145

8.4	Nullstellen der Zustandssumme	147
8.5	Dualitätsrelationen für Potts-kette	150
8.6	Programm: Simulation des $1d$ Ising Modells	151
9	Heiße und kalte Spinmodelle	155
9.1	Isingkette	155
9.2	$2d$ Ising-Modell	157
9.2.1	Hochtemperaturentwicklung	158
9.2.2	Tiefemperaturentwicklung	166
9.3	Aufgaben	172
10	Einige exakte Resultate	173
10.1	Dualität für das $2d$ Ising-Modell	173
10.2	Dualität für das $3d$ Ising-Modell	180
10.3	Peierls Argument	183
10.4	Korrelationsungleichungen	189
10.5	Anhang B: Differenzenkalkül	192
11	Renormierungsgruppe	205
11.1	Ising-Modelle	206
11.1.1	Ising-Kette	206
11.1.2	Das zweidimensionale Modell	210
11.2	Fixpunkte	213
11.2.1	Herleitung der Skalengesetze	218
11.3	Blockspintransformation	222
11.4	Kontinuumsliches für freies Feld	228
11.5	Kontinuumsliches für Spinmodelle	232
11.6	Programm: Blockspintransformation	233
12	Reine Gittereichtheorien	236
12.1	Eichtheorien im Kontinuum	237
12.1.1	Paralleltransport	240
12.2	Das Gitterfeld	243
12.2.1	Wilsonsche Wirkung für Eichtheorien	244
12.3	Invariantes Maß	247
12.3.1	Das Theorem von Peter und Weyl	250
12.4	Zweidimensionale Modelle	252
12.4.1	\mathbb{Z}_2 -Eichtheorie	252
12.4.2	$U(1)$ -Eichtheorie	253

12.4.3 \mathbb{Z}_N -Eichtheorien	255
12.4.4 SU(2)-Eichtheorie	256
12.5 Observablen	257
12.5.1 Die Stringspannung	258
12.6 Nicht-Abelsche $2d$ -Eichtheorien	260
12.6.1 Casimir Scaling von Polyakovschleifen	262
12.7 Starke Kopplung	267
12.8 Gluebälle	269
12.8.1 Die Würfelgruppe	271
12.9 Anhang: Haar-Maß	275
13 Spinorfelder	277
13.1 Grassmann Variablen	279
13.2 Spinorfelder auf dem Gitter	282
13.2.1 Gitterableitungen	282
13.2.2 Naive Fermionen auf dem Gitter	287
13.2.3 Wilson-Fermionen	290
13.2.4 Staggered Fermionen	293
13.3 Das Nielsen-Ninomiya Theorem	294
13.4 Ginsparg-Wilson Relation	297
13.4.1 Weitere Vorschläge	300
13.5 Programme zu Kapitel 10	301
Bibliography	304
Index	312

Kapitel 1

Einführung

Eine relativistische Quantenfeldtheorie ist

- eine Vereinigung von Quantenmechanik und spezieller Relativitätstheorie,
- eine Erweiterung der Quantenmechanik auf unendlich viele Freiheitsgrade,
- eine geeignete Sprache zur Beschreibung von Elementarteilchen,
- eine der umfangreichsten und komplexesten Theorien der Physik,
- einem ständigen Wandel unterworfen.

In der Festkörperphysik spielen nichtrelativistische Quantenfeldtheorien bei der Behandlung von Elementaranregungen und deren Wechselwirkungen eine zunehmend wichtige Rolle. Bekannte Beispiele sind die Elektron-Phonon Wechselwirkung oder die Spin-Wechselwirkungen, die für ein Verständnis des Magnetismus wichtig sind. In dieser Vorlesung werden wir uns (bis auf das Kapitel über Spinmodelle) vorwiegend mit relativistischen Quantenfeldtheorien beschäftigen.

Die elementare Quantenmechanik beschreibt eine feste Anzahl Teilchen, zum Beispiel in einem äußeren elektromagnetischen Feld. Die Quantenfeldtheorie (QFT) geht dagegen vom Wellencharakter der Materie aus. Korpuskulare Aspekte wie Teilchen-erzeugung oder Vernichtung werden in einem zweiten Schritt durch eine „Quantisierung“ der entsprechenden klassischen Feldtheorien eingeführt. Man spricht dann von *Feldquantisierung* oder etwas irreführend von *zweiter Quantisierung*¹. Schon im Artikel von M. BORN und P. JORDAN [1] wird die Quantisierung des elektromagnetischen Feldes skizziert. In der anschließenden bahnbrechenden 'Drei-Männer-Arbeit' von BORN, HEISENBERG und JORDAN [2] wurde die Quantisierung eines Systems mit einer beliebigen Anzahl Freiheitsgrade ausgearbeitet.

¹Dieser Begriff geht auf P. Jordan zurück.

Die Quantenfeldtheorie wurde zur Beschreibung von Elementarteilchen und deren Wechselwirkungen entwickelt, und zuerst auf die Wechselwirkung der Photonen mit Atomen angewandt. In seinen Arbeiten legte P. DIRAC das Fundament zur Quantenelektrodynamik (QED) [3]. Er studierte darin das Strahlungsfeld $A_\mu(x)$ und seine Kopplung an ein Atom. Indem er das Strahlungsfeld nicht mehr klassisch (im Maxwellschen Sinne) sondern als operatorwertiges Feld (durch „Quantisierung“ der Koeffizienten in der Fourierentwicklung von $A_\mu(x)$) auffasste, gelang ihm eine Überwindung der semiklassischen Beschreibung der quantenhaften Emission und Absorption von Photonen bei Strahlungsübergängen. Damit verband er die Quantenmechanik von HEISENBERG und SCHRÖDINGER mit der Quantentheorie der Strahlung im Sinne von PLANCK oder EINSTEIN. Die Materie wurde dabei allerdings noch im Teilchenbild behandelt. Die vollständige und mit der speziellen Relativitätstheorie verträgliche Quantisierung der Elektrodynamik gelang P. JORDAN, W. PAULI und W. HEISENBERG [4]. Hierin wurden die wechselwirkenden Dirac- und Maxwellfelder quantisiert. In ihrer Arbeit von 1929 führten HEISENBERG und PAULI die Lagrangefunktion für Felder ein, sprechen von kanonisch konjugierten Variablen und benutzten eine Quantisierungsvorschrift, die wir heute *kanonisch* nennen. Die Feldgleichungen folgten nun aus einem Wirkungsprinzip. Dieser Zugang zur Feldtheorie hat sich durchgesetzt und gilt auch heute noch als das Verfahren zur Konstruktion von Feldtheorien. Die Probleme mit der Einteilcheninterpretation des quantisierten Klein-Gordon-Feldes wurde einige Jahre später von PAULI und WEISSKOPF gelöst [5].

In Quantenfeldtheorien werden zunächst die freien, nichtwechselwirkenden Felder einer Teilchensorte quantisiert und die Wechselwirkung der als punktförmig angenommenen Teilchen danach durch eine lokale, d.h. in jedem Raumzeitpunkt als Produkt der wechselwirkenden Felder oder deren Ableitungen definierte Wechselwirkungsdichte eingeführt. Dieses Vorgehen führt jedoch bei einer direkten Berechnung zu divergenten Ausdrücken für physikalische Größen, zum Beispiel zu unendlich großen Selbstenergien. Dieses Problem führte auf das Renormierungsverfahren, dessen Ursprung bereits in den Untersuchungen von DIRAC, HEISENBERG, WEISSKOPF, PAULI, FIERZ und KRAMERS zu finden ist und in den bekannten Arbeiten von TOMONAGA, SCHWINGER, FEYNMAN und DYSON nach dem zweiten Weltkrieg im Wesentlichen vollendet wurde. Für so-geannte renormierbare Quantenfeldtheorien gibt es ein konsistentes Verfahren, bestehend aus einer Regularisierung und anschließenden Renormierung der Felder und Kopplungskonstanten, so dass die Theorien nach Festlegung von wenigen physikalischen Parametern (Massen und Kopplungsstärken) in jeder Ordnung der Störungstheorie Vorhersagen für alle weiteren Größen machen.

Die QED ist das einfachste und am besten studierte Modell einer renormierbaren Quantenfeldtheorie. Hier tritt die elektromagnetische Wechselwirkung in reiner

Form in Erscheinung. Die beispiellose Genauigkeit der Berechnungen der QED basieren auf dem Gebrauch der Störungstheorie. Dabei dient die dimensionslose Sommerfeldsche Feinstrukturkonstante $\alpha = e^2/\hbar c \sim 1/137$ als Entwicklungsparameter. Am weitesten wurde die Berechnung des magnetischen Moments des Elektrons vorangetrieben, für das die Glieder der Ordnungen $\alpha, \alpha^2, \alpha^3$ und α^4 bestimmt wurden. Die Rechnungen stimmen bis zur zehnten Stelle hinter dem Komma mit den experimentellen Werten überein.

Neben der weiteren Entwicklung von Rechentechniken im Rahmen der Störungstheorie waren die Jahre zwischen 1930 und 1960 dem formalen Ausbau der Feldtheorie gewidmet. Der Zusammenhang zwischen Spin und Statistik wurde entdeckt, das CPT-Theorem fand seine erste Formulierung und die Darstellungstheorie der (Anti)-Vertauschungsregeln wurde entwickelt. Symmetrieprinzipien traten zunehmend in den Vordergrund. Gerade im Rahmen der QED wurden viele fundamentale Begriffe und Gesetzmäßigkeiten der Quantenfeldtheorien entdeckt und formuliert.

In Verallgemeinerung ihres Vorbilds wurden die komplizierteren Theorien der starken und schwachen Wechselwirkung und auch die Modelle der großen Vereinheitlichung (GUTS) konstruiert. Die letzten Jahrzehnte waren geprägt von unseren Bemühungen, das allgemeine Grundkonzept aus den Gründerjahren 1927-29 auf diese so-geannten *Eichtheorien* zu erweitern. Zuerst schien es, als ob die in der QED so erfolgreiche Störungstheorie auf die anderen Wechselwirkungen nicht anwendbar sei. Die schwache Wechselwirkung, die zum Beispiel für den radioaktiven Beta-Zerfall verantwortlich ist, schien zu schwach zu sein als dass höhere Ordnungen der Störungstheorie eine Rolle spielen könnten. Zudem war die ursprüngliche, von FERMI entwickelte Theorie der schwachen Wechselwirkung nicht renormierbar. Auf die starke Wechselwirkung, welche zum Beispiel die Nukleonen zusammenhält, schien dagegen wegen ihrer Stärke die Störungstheorie nicht anwendbar.

Im Jahre 1972 wurde von G. 'T HOOFT bewiesen, dass spontan gebrochene Eichtheorien, wie sie zur Beschreibung der schwachen Wechselwirkung gebraucht werden, renormierbar sind. Ab dieser Zeit wuchs das Interesse an den so-geannten Yang-Mills-Theorien. Während die *QED* eine Eichtheorie mit Abelscher Eichgruppe $U(1)$ ist, sind die Yang-Mills-Theorien Eichtheorien mit nicht-Abelschen Eichgruppen. Für die Kraft zwischen schwach wechselwirkenden Teilchen sorgen 80 GeV schwere W - und Z -Bosonen, ähnlich wie elektrisch geladene Teilchen über den Photonaustausch wechselwirken. Die Theorie der elektroschwachen Wechselwirkung, also der vereinheitlichten elektromagnetischen und schwachen Wechselwirkungen, wurde von GLASHOW, WEINBERG und SALAM [6] entwickelt. Ist die Energie der Teilchen sehr viel kleiner als die Masse der Eichbosonen, so geht das renormierbare Weinberg-Salam-Modell in die effektive und nicht-renormierbare Theorie von FER-

MI über. 1973 zeigte sich, dass die der starken Wechselwirkung zugrundeliegende Quantenchromodynamik (QCD) - die Eichtheorie für Quarks und Gluonen - asymptotisch frei ist, so dass bei sehr hohen Energien oder sehr kleinen Distanzen die Kopplung schwächer wird und die Störungstheorie angewandt werden darf. In den frühen 1990ern waren bereits die meisten zweite-Ordnung Korrekturen zu den wichtigen QCD-Prozessen berechnet. In allen Bereichen in denen die Störungstheorien anwendbar sind stimmen theoretische und experimentelle Resultate überein. Gerade im elektroschwachen Sektor ist diese Übereinstimmung hervorragend.

Ein tieferes, nicht auf der Störungsentwicklung fußendes, Verständnis der Renormierung wurde mit Hilfe der Euklidischen Funktionalintegralformulierung von Quantenfeldtheorien erreicht. Diese ist die Euklidische Version des Feynmanschen Pfadintegrals [7, 8]. Dabei wird die Zeitvariable zu imaginären Werten fortgesetzt [9]. Euklidische Funktionalintegrale liefern die Verbindung zwischen Quantenfeldtheorie und statistischer Mechanik. Diese Beziehung war in der Vergangenheit sehr fruchtbar für die QFT und für die statistische Mechanik. In den 70er Jahren wurden Gitterfeldtheorien und insbesondere Gittereichtheorien zunehmend zu einem wesentlichen Bereich der theoretischen Hochenergiephysik. Nach Vorarbeiten von WEGNER [10] formulierte WILSON 1974 eine Gittereichtheorie, deren Kontinuumslimites einer Euklidischen Version der Quantenchromodynamik entspricht [11].

1979 begannen CREUTZ, JACOBS und REBBI mit Monte-Carlo-Simulationen verschiedener Eichtheorien und untersuchten das Confinement in Theorien ohne Materie [12]. Innerhalb weniger Jahre etablierten sich numerische Methoden und heute sind Monte-Carlo-Simulationen des Standardmodells neben der Störungstheorie zu einem der wichtigsten Hilfsmittel der Hochenergiephysik geworden. Die Gitterformulierung von Quantenfeldtheorien ist nicht-störungstheoretisch und erlaubt einen komplementären Zugang zu vielen Observablen, die oft störungstheoretisch nicht direkt zugänglich sind.

1.1 Literaturempfehlungen:

- C. Itzykson und J.B. Zuber, *Quantum Field Theory*, Dover Publications Inc, 2006.
M. Böhm, A. Denner und H. Joos, *Gauge Theories of the Strong and Electroweak Interaction*, Teubner, 2001.
J. Glimm und A. Jaffe, *Quantum Physics - A Functional Integral Point of View*, Springer, 1981.
G. Roepstorff, *Path Integral Approach to Quantum Physics: An Introduction*, Springer, 1996.
L. Schulman, *Techniques and Applications of Path Integration*, John Wiley & Sons,

New York, 1981

M. Creutz, *Quarks , Gluons and Lattices*, Cambridge University Press, 1983.

Istvan Montvay und Gernot Münster, *Quantum Fields on a Lattice*, Cambridge University Press, 1997.

H.J. Rothe, *Lattice Gauge Theories - An Introduction*, World Scientific Publishing, 2005.

Jan Smit, *Introduction to Quantum Fields on the Lattice*, Lecture notes in physics, Cambridge University Press, 2002

R.J. Baxter, *Exactly Solved Models in Statistical Mechanics*, Academic Press, 1982.

Kapitel 2

Pfadintegrale

Aus Ihren bisherigen Vorlesungen kennen Sie die Formulierungen der Quantenmechanik von HEISENBERG, SCHRÖDINGER und Kollegen. Bereits 1933 spekulierte DIRAC, ob die klassische Wirkung in der Quantenmechanik eine ähnlich wichtige Rolle spielen könnte wie in der klassischen Mechanik [7]. Er glaubte, daß die Wahrscheinlichkeitsamplitude für die Propagation von q nach q' in der Zeit t ,

$$K(t, q', q) = \langle q' | e^{-iHt/\hbar} | q \rangle \quad (2.1)$$

gegeben ist durch

$$K(t, q', q) \propto e^{iS[q_{cl}]/\hbar}, \quad (2.2)$$

wobei q_{cl} die klassische Bahn von q nach q' in der Zeit t bezeichnet. Der Exponent ist dimensionslos, da \hbar die Dimension einer Wirkung hat. Für ein freies Teilchen mit Hamilton- und Lagrangefunktion

$$H_0 = \frac{1}{2m}p^2 \quad \text{und} \quad L_0 = \frac{m}{2}\dot{q}^2 \quad (2.3)$$

kann man die obige Formel leicht nachprüfen: Freie Teilchen bewegen sich längs Geraden und der zur Zeit 0 bei q beginnende und zur Zeit t bei q' endende Weg ist

$$q_{cl}(s) = \frac{1}{t} \{sq' + (t-s)q\} \implies S[q_{cl}] = \int_0^t ds L_0[q_{cl}(s)] = \frac{m}{2t}(q' - q)^2.$$

Dies führt auf die Amplitude

$$K_0(t, q', q) \propto e^{im(q' - q)^2/2\hbar t}.$$

Der Proportionalitätsfaktor ist bestimmt durch die Bedingung $e^{-iHt/\hbar} \xrightarrow{t \rightarrow 0} \mathbb{1}$, welche in der Ortsdarstellung die Form

$$\lim_{t \rightarrow 0} K(t, q', q) = \delta(q', q) \quad (2.4)$$

annimmt. Er ist auch bestimmt durch die Eigenschaft $e^{-iHt/\hbar} e^{-iHs/\hbar} = e^{-iH(t+s)/\hbar}$ mit der entsprechenden Form in der Ortsdarstellung,

$$\int du K(t, q', u) K(s, u, q) = K(t + s, q', q). \quad (2.5)$$

Auf diese Weise findet man den korrekten Propagator für ein freies Teilchen,

$$K_0(t, q', q) = \left(\frac{m}{2\pi i \hbar t} \right)^{1/2} e^{iS[q_{cl}]/\hbar}. \quad (2.6)$$

Ähnliche Resultate erhält man für Systeme in denen $\langle \hat{q} \rangle$ die klassische Bewegungsgleichung erfüllt, d.h. Systeme für die gilt $\langle V'(\hat{q}) \rangle = V'(\langle \hat{q} \rangle)$. Für nichtlineare Systeme muß die Formel (2.6) modifiziert werden. 1948 gelang es FEYNMAN schließlich, das Diracsche Resultat auf allgemeinere Systeme zu erweitern [8]. Er fand eine alternative Formulierung der Quantenmechanik, aufbauend auf der Tatsache, daß der Propagator als Summe der Amplituden *aller Wege* (und nicht nur der klassischen) von q nach q' geschrieben werden kann. In der Quantenmechanik kann ein Teilchen auf beliebigen Wegen $q(s)$ vom Anfangs- zum Endpunkt gelangen,

$$q(0) = q \quad \text{und} \quad q(t) = q'. \quad (2.7)$$

Die Amplitude für einen einzelnen Weg ist $\sim \exp(iS[\text{Weg}]/\hbar)$ und die Amplitude für alle Wege ist nach den Regeln der Quantenmechanik die Summe der einzelnen Amplituden,

$$K(t, q', q) \sim \sum_{\text{alle Wege}} e^{iS[\text{Weg}]/\hbar}. \quad (2.8)$$

Bei der Untersuchung von stochastischen Prozessen beschäftigte sich WIENER schon früher mit der Summe über alle Wege [13]. Dabei wurde dem einzelnen Weg aber eine reelle und positive Wahrscheinlichkeit und nicht eine komplexe Amplituden zugeordnet. Das Wienersche Wegintegral entspricht dem Feynman Wegintegral für „imaginäre Zeiten“ und findet seine Anwendungen in der statistischen Physik. Die Wegintegralmethode gestattet eine einheitliche Sichtweise auf Quantenmechanik, Quantenfeldtheorie und statistische Mechanik und ist ein unersetzliches Werkzeug

in der modernen theoretischen Physik. Sie ist ein alternativer Zugang zur kanonischen Quantisierung klassischer Systeme.

Sie feierte erste große Erfolge in den 1950er Jahren und ist sehr schön und verständlich in Feynman's ursprünglichen Arbeit [8] und in seinem Buch mit HIBBS [14] dargelegt. Dieses Buch enthält auch viele Anwendungen und gilt heute immer noch als eine Standardreferenz. Funktionalintegrale wurden von herausragenden Mathematikern und Physikern, und insbesondere von KAC, weiterentwickelt [15]. Eine gute Referenz für diese Entwicklung ist der Übersichtsartikel von GELFAND und YAGLOM [16].

Ich kann in dieser Vorlesung nur eine Einführung in Wegintegrale geben. Für ein tieferes Verständnis müssen sie die Literatur konsultieren. Es gibt viele gute Bücher und Übersichtsartikel über Wegintegrale. Einige sind in der Literaturliste angegeben. Insbesondere die Zitate [17]-[21] enthalten einführendes Material.

Etwa alle zwei Jahre wird an unserer Fakultät eine Vorlesung über Pfadintegrale angeboten. Zur Vorlesung im Wintersemester 2001/2002 existiert ein Skript, welches Sie unter <http://www.tpi.uni-jena.de/~wipf/hpwipf.html>, über den Link `lecture notes in ps.gz format` abrufen können. Das vorliegende Kapitel ist eine verkürzte und übersetzte Version von Teilen des Skriptes.

2.1 Wiederholung der Quantenmechanik

Bekanntlich gibt es zwei Zugänge zur Quantisierung eines klassischen Systems - *kanonische Quantisierung* und *Pfadintegral Quantisierung*. Ich gehe davon aus, daß sie mit der ersten, also Schrödingers Wellenmechanik und Heisenbergs Matrizenmechanik, vertraut sind. Trotzdem wiederhole ich nochmals die wesentlichen Schritte der kanonischen Quantisierung.

Ein klassisches System wird beschrieben durch seine Koordinaten $\{q^i\}$ und Impulse $\{p_i\}$ im *Phasenraum* Γ . Observablen sind Funktionen $O : \Gamma \rightarrow \mathbb{R}$. Die Energie $H(q, p)$ ist ein wichtiges Beispiel. Es existiert eine symplektische Struktur auf Γ , d.h. lokal existieren Koordinaten mit Poisson-Klammern

$$\{q^i, p_j\} = \delta_j^i, \quad (2.9)$$

und diese Struktur wird mit Hilfe der Derivationsregel $\{OP, Q\} = O\{P, Q\} + \{O, Q\}P$ und der Antisymmetrie auf Observablen ausgedehnt. Die Zeitentwicklung einer Observablen ist gegeben durch

$$\dot{O} = \{O, H\}, \quad \text{e.g.} \quad \dot{q}^i = \{q^i, H\} \quad \text{und} \quad \dot{p}_i = \{p_i, H\}. \quad (2.10)$$

Nun „quantisieren“ wir das System, indem wir Observablen durch hermiteschen Operatoren auf einem Hilbertraum und Poisson-Klammern durch Kommutatoren ersetzen:

$$O(q, p) \rightarrow \hat{O}(\hat{q}, \hat{p}) \quad \text{und} \quad \{O, P\} \longrightarrow \frac{1}{i\hbar} [\hat{O}, \hat{P}]. \quad (2.11)$$

Die Zeitentwicklung einer nicht explizit zeitabhängigen Observablen ist im Heisenbergbild durch die *Heisenberggleichung*

$$\frac{d\hat{O}}{dt} = \frac{i}{\hbar} [\hat{H}, \hat{O}] \quad (2.12)$$

bestimmt. Speziell die Phasenraumkoordinaten (q^i, p_i) werden zu Operatoren mit einer Zeitentwicklung gemäß

$$\frac{d\hat{q}^i}{dt} = \frac{i}{\hbar} [\hat{H}, \hat{q}^i] \quad \text{und} \quad \frac{d\hat{p}_i}{dt} = \frac{i}{\hbar} [\hat{H}, \hat{p}_i] \quad \text{mit} \quad [\hat{q}_i, \hat{p}_j] = i\hbar\delta_j^i.$$

Für nicht-relativistische Teilchen mit Hamiltonoperator

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{V}, \quad \text{mit} \quad \hat{H}_0 = \frac{1}{2m} \sum \hat{p}_i^2 \quad (2.13)$$

findet man die bekannten Bewegungsgleichungen

$$\frac{d\hat{q}^i}{dt} = \frac{\hat{p}_i}{m} \quad \text{und} \quad \frac{d\hat{p}_i}{dt} = -\hat{V}_{,i}. \quad (2.14)$$

Die Observablen werden auf einem Hilbertraum \mathcal{H} , dessen Elemente die Systemzustände charakterisieren, dargestellt,

$$\hat{O}(\hat{q}, \hat{p}) : \mathcal{H} \longrightarrow \mathcal{H}. \quad (2.15)$$

Für ein in einer Dimension gefangene Teilchen ist der Hilbertraum $\mathcal{H} = L_2(\mathbb{R})$ und in der Ortsdarstellung haben Ort- und Impulsoperator die Darstellung

$$(\hat{q}\psi)(q) = q\psi(q) \quad \text{und} \quad (\hat{p}\psi)(q) = \frac{\hbar}{i} \partial_q \psi(q). \quad (2.16)$$

In Experimenten werden Matrixelemente von Observablen gemessen, zum Beispiel der Erwartungswert des der Observablen zugeordneten Operators \hat{O} in einem gegebenen Zustand $|\psi\rangle$. Die Zeitabhängigkeit des Erwartungswertes $\langle \psi | \hat{O}(t) | \psi \rangle$ folgt dann aus den Heisenberg-Gleichungen (2.12). Im Folgenden kennzeichnen wir Operato-

ren nur noch bei Bedarf mit einem Hut.

Wechselt man mit einer (zeitabhängigen) Ähnlichkeitstransformation vom Heisenberg- ins Schrödingerbild,

$$O_s = e^{-itH/\hbar} O e^{itH/\hbar} \quad \text{und} \quad |\psi_s\rangle = e^{-itH/\hbar} |\psi\rangle, \quad (2.17)$$

dann werden Observablen zeitunabhängig,

$$\frac{d}{dt} O_s = e^{-itH/\hbar} \left(-\frac{i}{\hbar} [H, O] + \frac{d}{dt} O \right) e^{itH/\hbar} = 0.$$

Der Hamilton-Operator ändert allerdings nicht, $H_s = H$. Nach Konstruktion bleiben auch Erwartungswerte invariant,

$$\langle \psi | O(t) | \psi \rangle = \langle \psi_s(t) | O_s | \psi_s(t) \rangle. \quad (2.18)$$

Nach der Transformation $\{O(t), |\psi\rangle\} \longrightarrow \{O_s, |\psi_s(t)\rangle\}$ ins Schrödingerbild entwickeln sich die Zustände gemäß der *Schrödingergleichung*

$$i\hbar \frac{d}{dt} |\psi_s\rangle = H |\psi_s\rangle \iff |\psi_s(t)\rangle = e^{-itH/\hbar} |\psi_s(0)\rangle. \quad (2.19)$$

In der Ortsdarstellung hat diese formale Lösung die Form

$$\begin{aligned} \psi_s(t, q') \equiv \langle q' | \psi_s(t) \rangle &= \int \langle q' | e^{-itH/\hbar} | q \rangle \langle q | \psi_s(0) \rangle dq \\ &\equiv \int K(t, q', q) \psi_s(0, q) dq. \end{aligned} \quad (2.20)$$

Dabei benutzen wir die Zerlegung der Eins,

$$\int dq |q\rangle \langle q| = \mathbb{1}, \quad (2.21)$$

und führten den Kern für die unitäre Zeitentwicklung ein,

$$K(t, q', q) = \langle q' | e^{-itH/\hbar} | q \rangle \quad (2.22)$$

Hier ist $K(t, q', q)$ die *Wahrscheinlichkeitsamplitude* für die Propagation von q zur Zeit 0 nach q' zur Zeit t . Man schreibt auch

$$K(t, q', q) \equiv \langle q', t | q, 0 \rangle. \quad (2.23)$$

Diese Amplitude erfüllt die zeitabhängige Schrödingergleichung

$$i\hbar \frac{d}{dt} K(t, q', q) = H K(t, q', q), \quad (2.24)$$

wobei H auf q' wirkt, und die Anfangsbedingung

$$\lim_{t \rightarrow 0} K(t, q', q) = \delta(q' - q). \quad (2.25)$$

Der Propagator K ist durch diese beiden Bedingungen eindeutig bestimmt. Zum Beispiel hat für das nicht-relativistische freie Teilchen in d Dimensionen mit Hamiltonoperator H_0 in (2.13) der Propagator die explizite Form

$$K_0(t, q', q) = \langle q' | e^{-itH_0/\hbar} | q \rangle = \left(\frac{m}{2\pi i\hbar t} \right)^{d/2} e^{im(q'-q)^2/2\hbar t}, \quad q, q' \in \mathbb{R}^d. \quad (2.26)$$

Speziell in einer Dimension ist

$$K_0(t, q', q) = \left(\frac{m}{2\pi i\hbar t} \right)^{1/2} e^{im(q'-q)^2/2\hbar t}. \quad (2.27)$$

Nach diesen Vorbereitungen kommen wir nun zur Pfadintegraldarstellung des Propagators für ein Quantensystem mit Hamiltonoperator H .

2.2 Feynman-Kac Formel

In diesem Abschnitt leiten wir die Feynmansche Pfadintegraldarstellung für den unitären Zeitentwicklungsoperator $\exp(-iHt)$ und die Kac'sche Pfadintegraldarstellung für den positiven Operator $\exp(-H\tau)$ ab.

Wir werden die Produktformel von Trotter benötigen. Für Matrizen wurde sie bereits von LIE bewiesen, und in dieser Version lautet sie:

Satz von Lie *Für zwei Matrizen A und B gilt*

$$e^{A+B} = \lim_{n \rightarrow \infty} (e^{A/n} e^{B/n})^n.$$

Wir beweisen diese einfache Formel. Mit den Definitionen $S_n := \exp[(A+B)/n]$ und $T_n := \exp[A/n] \exp[B/n]$ können wir schreiben

$$\begin{aligned} \|e^{A+B} - (e^{A/n} e^{B/n})^n\| &= \|S_n^n - T_n^n\| \\ &= \|S_n^{n-1}(S_n - T_n) + S_n^{n-2}(S_n - T_n)T_n + \cdots + (S_n - T_n)T_n^{n-1}\|. \end{aligned}$$

Die Norm eines Produktes ist kleiner gleich dem Produkt der Normen, und deshalb gilt $\|\exp(X)\| \leq \exp(\|X\|)$. Mit der Dreiecksungleichung folgt dann

$$\|S_n\|, \|T_n\| \leq a^{1/n} \quad \text{mit} \quad a = e^{\|A\|+\|B\|},$$

und damit

$$\|S_n^n - T_n^n\| \leq n \cdot a^{(n-1)/n} \|S_n - T_n\|.$$

Benutzen wir noch $S_n - T_n = -[A, B]/2n^2 + O(1/n^3)$, so ist die Produktformel für Matrizen bewiesen.

Der Satz gilt allerdings auch für unbeschränkte selbstadjungierte Operatoren A, B für die $A + B$ auf dem Durchschnitt ihrer Definitionsbereiche (wesentlich) selbstadjungiert ist:

Satz von Trotter: *Sind A, B selbstadjungierte Operatoren und ist $A + B$ (wesentlich) selbstadjungiert auf dem Durchschnitt \mathcal{D} ihrer Definitionsbereiche, so gilt*

$$e^{-it(A+B)} = s - \lim_{n \rightarrow \infty} (e^{-itA/n} e^{-itB/n})^n. \quad (2.28)$$

Sind A und B zusätzlich nach unten beschränkt, dann gilt auch

$$e^{-\tau(A+B)} = s - \lim_{n \rightarrow \infty} (e^{-\tau A/n} e^{-\tau B/n})^n. \quad (2.29)$$

Der starke Limes bedeutet, daß die Konvergenz für alle Zustände $\psi \in \mathcal{D}$ gilt. Die Formel (2.28) wird in der Quantenmechanik gebraucht, die Formel (2.29) dagegen in der statistischen Mechanik sowie euklidischen Formulierung der Quantenmechanik [22, 23].

Nun nehmen wir an, daß $H = H_0 + V$ ist und wenden die Produktformel (2.28) auf (2.22) an. Mit $\epsilon = t/n$ und $\hbar = 1$ erhalten wir

$$\begin{aligned} K(t, q', q) &= \lim_{n \rightarrow \infty} \langle q' | (e^{-i\epsilon H_0} e^{-i\epsilon V})^n | q \rangle \\ &= \lim_{n \rightarrow \infty} \int dq_1 \cdots dq_{n-1} \prod_{j=0}^{j=n-1} \langle q_{j+1} | e^{-i\epsilon H_0} e^{-i\epsilon V} | q_j \rangle, \end{aligned} \quad (2.30)$$

wobei wir $\int dq_j |q_j\rangle \langle q_j| = \mathbb{1}$ benutzten sowie $q = q_0$ und $q' = q_n$ setzten. Das Potential V ist diagonal in der Ortsdarstellung, so daß

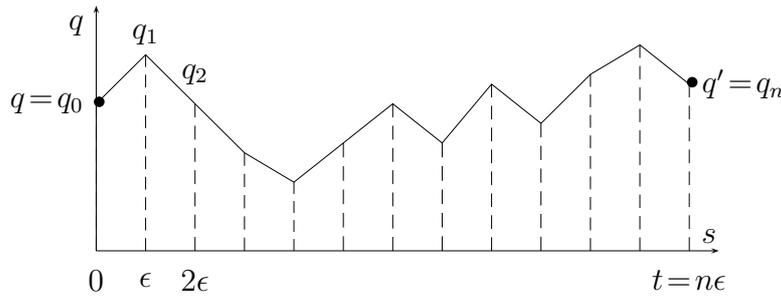
$$\langle q_{j+1} | e^{-i\epsilon H_0} e^{-i\epsilon V} | q_j \rangle = \langle q_{j+1} | e^{-i\epsilon H_0} | q_j \rangle e^{-i\epsilon V(q_j)}. \quad (2.31)$$

Jetzt setzen wir für den Propagator des freien Teilchens mit Hamiltonoperator H_0 das Resultat (2.26) ein. Es folgt

$$K(t, q', q) = \lim_{n \rightarrow \infty} \int dq_1 \cdots dq_{n-1} \left(\frac{m}{2\pi i \epsilon} \right)^{n/2} \cdot \exp \left\{ i \epsilon \sum_{j=0}^{j=n-1} \left[\frac{m}{2} \left(\frac{q_{j+1} - q_j}{\epsilon} \right)^2 - V(q_j) \right] \right\}. \quad (2.32)$$

Diese *Feynman-Kac Formel* liefert die gesuchte Pfadintegraldarstellung für den Zeitentwicklungskern.

Um zu sehen, warum die rechte Seite Pfad- oder Wegintegral heißt, verbinden wir die Punkte $q = q_0, q_1, \dots, q_{n-1}, q_n = q'$ mit Strecken, so daß wir einen Weg bestehend aus kleinen Geradenstücken erhalten, wie in der folgenden Abbildung gezeigt.



Wir unterteilen das Intervall $[0, t]$ in n gleich lange Teilintervalle der Länge $\epsilon = t/n$ und identifizieren q_k mit $q(s = k\epsilon)$. Dann ist der Exponent in (2.32) das Riemannsche Integral für die klassische Wirkung eines sich längs des stückweise geraden Weges bewegendes Punktteilchens,

$$\sum_{j=0}^{j=n-1} \epsilon \left[\frac{m}{2} \left(\frac{q_{j+1} - q_j}{\epsilon} \right)^2 - V(q_j) \right] = \int_0^t ds \left[\frac{m}{2} \left(\frac{dq}{ds} \right)^2 - V(q(s)) \right]. \quad (2.33)$$

Das $n - 1$ -fache Integral $\int dq_1 \dots dq_{n-1}$ ist dann die Summe über alle stückweise geraden Wege von q nach q' . Da jeder stetige Weg von q nach q' durch einen stückweise geraden Weg approximiert werden kann und da wir den Kontinuumsmites $n \rightarrow \infty$ beziehungsweise $\epsilon \rightarrow 0$ vollführen, können wir das Integral als Summe über alle Wege ansehen, die zur Zeit $t = 0$ bei q beginnen und zur Zeit t bei q' enden. Setzen wir noch

$$\left(\frac{m}{2\pi i \epsilon} \right)^{n/2} = C \quad (2.34)$$

mit einer Konstanten C , welche zu einem unitären Zeitentwicklungskern Anlaß gibt, dann finden wir

$$K(t, q', q) = C \int_{q(0)=q}^{q(t)=q'} \mathcal{D}q e^{iS[q]/\hbar}. \quad (2.35)$$

Das formale Maß $\mathcal{D}q$ ist über den Grenzprozess (2.32) erklärt. Da das unendliche Produkt von Lebesquemaßen nicht existiert, hat \mathcal{D} keine präzise mathematische Bedeutung. Aber man kann ein Maß auf allen Wegen definieren, wenn man das Pfadintegral zu imaginären Zeiten fortsetzt.

Die Formel (2.35) gilt auch für Teilchen, die sich in mehr als einer Dimension bewegen, oder für allgemeinere Systeme mit verallgemeinerten Koordinaten q^1, \dots, q^N . Für weitere Eigenschaften des Pfadintegrals sowie Beispiele und Anwendungen verweise ich auf [24].

2.3 Euklidisches Pfadintegral

Der oszillierende Integrand $\exp(iS)$ im Pfadintegral (2.35) führt auf Distributionen. Falls es gelingen würde, die Oszillationen zu unterdrücken, dann gäbe es vielleicht die Möglichkeit, ein wohldefiniertes Pfadintegral zu konstruieren. Dies mag erklären, warum in beinahe allen rigorosen Arbeiten zum Pfadintegral eine imaginäre Zeit angenommen wird. Für imaginäre Zeiten kann in der Tat ein Maß auf allen Pfaden streng konstruiert werden und die Konstruktion führt auf das Wiener-Maß. Mit einer sogenannten Wickdrehung wird also t zu imaginären Zeiten analytisch fortgesetzt und bei der inversen Wickdrehung rotiert man wieder zurück zu reellen Zeiten. In der Praxis ersetzt man im Pfadintegral (2.35) die Zeit t durch $-i\tau$, versucht das so erhaltene euklidische Pfadintegral zu lösen, und ersetzt in der Lösung die imaginäre Zeit τ wieder durch it .

2.3.1 Quantenmechanik für imaginäre Zeiten

Für selbstadjungierte Hamilton-Operatoren hat der unitäre Zeitentwicklungsoperator die Spektraldarstellung

$$U(t) = e^{-iHt} = \int e^{-iEt} dP_E, \quad (2.36)$$

wobei P_E die spektrale Familie von H ist. Der Träger des Integrales ist das Spektrum von H . Für ein diskretes Spektrum ist P_E der orthogonale Projektor auf den von allen

Eigenfunktionen mit Energien $\leq E$ aufgespannten Unterraum von \mathcal{H} . Wir wollen annehmen, daß der Hamilton-Operator nach unten beschränkt ist. Dann können wir eine Konstante addieren, so daß $H \geq 0$ gilt und das Integral (2.36) von 0 bis ∞ geht. Jetzt ersetzen wir $t \rightarrow t - i\tau$ mit dem Resultat

$$e^{-(\tau+it)H} = \int_0^\infty e^{-E(\tau+it)H} dP_E. \quad (2.37)$$

Mit unseren Annahmen ist dies eine holomorphe Halbgruppe in der unteren komplexen Halbebene

$$\{t - i\tau \in \mathbb{C}, \tau \geq 0\}. \quad (2.38)$$

Kennen wir den Operator (2.37) auf der unteren imaginären Achse ($t = 0, \tau \geq 0$), dann können wir zur reellen Achse ($t, \tau = 0$) analytisch fortsetzen. Wenn wir in der Minkowski Metrik $ds^2 = dt^2 - dx^2 - dy^2 - dz^2$ die Zeit fortsetzen, $t \rightarrow -i\tau$ dann erhalten wir eine Metrik mit euklidischer Signatur. Deshalb nennt man die Theorie mit imaginärer Zeit oft euklidische Theorie. Streng genommen ist dieser Name nur für relativistische Feldtheorien (und nicht in der Quantenmechanik) angebracht.

Die Entwicklungsoperatoren $U(t)$ sind für alle reellen Zeiten definiert und bilden eine *einparametrische unitäre Gruppe*. $U(t)$ erfüllt die Schrödingergleichung

$$i \frac{d}{dt} U(t) = H U(t)$$

und der Kern $K(t, q', q) = \langle q' | U(t) | q \rangle$ ist komplex und oszillierend.

Für imaginäre Zeiten sind die „Entwicklungsoperatoren“

$$U(\tau) = e^{-\tau H} \quad (2.39)$$

hermitesch (und nicht unitär) mit reellem Spektrum. Die $U(\tau)$ existieren für positive τ und bilden eine *Halbgruppe*. Für beinahe alle Anfangsdaten ist eine Entwicklung in die „imaginäre Vergangenheit“ allerdings unmöglich. $U(\tau)$ erfüllt eine *Diffusionsgleichung*,

$$\frac{d}{d\tau} U(\tau) = -H U(\tau), \quad (2.40)$$

mit einem für reelle Hamilton-Operatoren reellen Kern¹

$$K(\tau, q', q) = \langle q', \tau | q, 0 \rangle = \langle q' | e^{-\tau H} | q \rangle \quad \text{mit} \quad K(0, q', q) = \delta(q', q). \quad (2.41)$$

Der Kern ist strikt positiv:

Satz: *Das Potential V sei stetig und nach unten beschränkt, und $H = -\frac{1}{2}\Delta + V$ sei wesentlich selbstadjungiert. Dann ist*

$$\langle q' | e^{-\tau H} | q \rangle > 0. \quad (2.42)$$

Für einen Beweis dieses Satzes verweise ich auf das Buch von GLIMM und JAFFE [21], Seite 50. Zum Beispiel sind die Kerne für das *freie Teilchen* in d Dimensionen und für imaginäre Zeiten

$$K_0(\tau, q', q) = \left(\frac{m}{2\pi\tau} \right)^{d/2} e^{-m(q'-q)^2/2\tau} \quad (2.43)$$

und den *harmonischen Oszillator* in d Dimensionen und für imaginäre Zeiten

$$K_\omega(\tau, q', q) = \left(\frac{m\omega}{2\pi \sinh \omega\tau} \right)^{d/2} \exp \left\{ -\frac{m\omega}{2} \left[(q'^2 + q^2) \coth \omega\tau - \frac{2q'q}{\sinh \omega\tau} \right] \right\}, \quad (2.44)$$

offensichtlich positiv. Diese Positivität ist wesentlich für die weitreichende Beziehung zwischen der euklidischen Quantenmechanik (Quantenfeldtheorie) und der Wahrscheinlichkeitstheorie. Die Größe

$$P(\tau, q) = C \cdot \langle q, \tau | 0, 0 \rangle = C \cdot K(\tau, q, 0), \quad (2.45)$$

kann als Wahrscheinlichkeit für die Bewegung von 0 nach q im Zeitintervall τ interpretiert werden². Die Wahrscheinlichkeit dafür irgendwo zu landen muß Eins sein,

$$C \cdot \int dq \langle q, \tau | 0, 0 \rangle = C \cdot \int dq K(\tau, q, 0) = 1, \quad (2.46)$$

und diese Forderung legt C fest. Für ein freies Teilchen erhält man

$$P_\tau(q) = \left(\frac{m}{2\pi\tau} \right)^{d/2} e^{-mq^2/2\tau},$$

¹Bei einer Kopplung an das magnetische Feld wird H und damit $U(\tau)$ komplex.

²Um die Notation einfach zu halten bezeichnet hier q und nicht q' den Endpunkt.

und dies ist die Wahrscheinlichkeitsdichte für die *Brownsche Bewegung* mit Diffusionskoeffizient $D = 1/2m$.

Vakuumerwartungswerte von Feldoperatoren an verschiedenen Raumzeitpunkten sind in einer Quantenfeldtheorie sehr wichtig und werden in dieser Vorlesung eine große Rolle spielen. In der Quantenmechanik haben diese Erwartungswerte die Form

$$W^{(n)}(t_1, \dots, t_n) = \langle 0 | q(t_1) \cdots q(t_n) | 0 \rangle, \quad q(t) = e^{itH} q e^{-itH}. \quad (2.47)$$

Diese nach ARTHUR WIGHTMAN benannten Funktionen ändern bei Vertauschung zweier Argumente, da Ortsoperatoren zu verschiedenen Zeiten nicht vertauschen. Wir dürfen wieder annehmen, daß die Energie des Grundzustandes $|0\rangle$ verschwindet. Nun setzen wir die Wightmanfunktionen zu komplexen Zeiten $z_i = t_i - i\tau_i$ fort,

$$W^{(n)}(z_1, \dots, z_n) = \langle 0 | q e^{-i(z_1 - z_2)H} q e^{-i(z_2 - z_3)H} q \cdots q e^{-i(z_{n-1} - z_n)H} q | 0 \rangle. \quad (2.48)$$

Wir haben benutzt, daß H den Grundzustand annihiliert und deshalb $\exp(i\zeta H) |0\rangle = |0\rangle$ gilt. Hier müssen die Imaginärteile der z_k geordnet sein,

$$\Im(z_k - z_{k+1}) \leq 0.$$

Mit obiger Definition der komplexen Zeiten z_i folgt die *Analytizität* von $W^{(n)}$ im Gebiet

$$\tau_1 > \tau_2 \cdots > \tau_n. \quad (2.49)$$

Die Wightmanfunktionen für reelle Zeiten sind deshalb die Randwerte der analytischen Wightmanfunktionen für komplexe Argumente

$$W^{(n)}(t_1, \dots, t_n) = \lim_{\substack{\Im z_i \rightarrow 0 \\ \Im(z_{k+1} - z_k) > 0}} W^{(n)}(z_1, \dots, z_n). \quad (2.50)$$

Die Funktionen mit imaginären Argumenten heißen *Schwingerfunktionen*,

$$\begin{aligned} S^{(n)}(\tau_1, \dots, \tau_n) &= W^{(n)}(-i\tau_1, \dots, -i\tau_n) \\ &= \langle 0 | q e^{-(\tau_1 - \tau_2)H} q e^{-(\tau_2 - \tau_3)H} q \cdots q e^{-(\tau_{n-1} - \tau_n)H} q | 0 \rangle. \end{aligned} \quad (2.51)$$

Wie sieht dies nun für den Oszillator mit (renormiertem) Hamilton-Operator

$$H = \omega a^\dagger a,$$

aus, wobei a und a^\dagger die bekannten Absteige- und Aufsteigeoperatoren sind,

$$q = \frac{1}{\sqrt{2m\omega}} (a^\dagger + a) \quad \text{und} \quad p = i\sqrt{\frac{m\omega}{2}} (a^\dagger - a) \quad \text{mit} \quad [a, a^\dagger] = 1.$$

Der Grundzustand $|0\rangle$ hat die Energie $E_0 = 0$ und der erste angeregte Zustand $|1\rangle = a^\dagger |0\rangle$ die Energie $E_1 = \omega$. Die Zweipunkt-Wightmanfunktion hängt nur von der Zeitdifferenz $t_1 - t_2$ ab,

$$\begin{aligned} W^{(2)}(t_1 - t_2) &= \langle 0 | q(t_1) q(t_2) | 0 \rangle = \frac{1}{2m\omega} \langle 0 | (a + a^\dagger) e^{-i(t_1 - t_2)H} (a + a^\dagger) | 0 \rangle \\ &= \frac{1}{2m\omega} \langle 1 | e^{-it\omega a^\dagger a} | 1 \rangle = \frac{e^{-i\omega(t_1 - t_2)}}{2m\omega}, \end{aligned}$$

und die zugehörige Schwingerfunktion hat die Form

$$S^{(2)}(\tau_1 - \tau_2) = \frac{e^{-\omega(\tau_1 - \tau_2)}}{2m\omega}. \quad (2.52)$$

In einer relativistischen Quantenfeldtheorie sind die Schwingerfunktionen $S^{(n)}$ invariant unter der euklidischen Lorentzgruppe $SO(4)$ und $S^{(n)}(x_1, \dots, x_n)$ ist eine symmetrische Funktion seiner Argumente $x_i \in \mathbb{R}^4$. In der Quantenmechanik ist dies nicht der Fall.

2.3.2 Das Pfadintegral für imaginäre Zeiten

Nun wollen wir die Pfadintegral-Formulierung der Quantenmechanik mit imaginärer Zeit formulieren. Wir erinnern daran, daß die Produktformel von Lie und Trotter (2.29) aus der Formel (2.27) hervorgeht, wenn man it durch τ ersetzt. Genauso wie im kanonischen Zugang dreht man die reelle Zeit t mit einer Wickrotation in die imaginäre Zeit $-i\tau$ oder euklidische Zeit τ . Dies ist allerdings nur statthaft, wenn H nach unten beschränkt ist. Mit denselben Argumenten wie in der Quantenmechanik mit reeller Zeit kann man die zu (2.32) analoge Formel für die euklidische Zeit τ beweisen. Die einzige Änderung ist die Ersetzung von $i\epsilon$ durch ϵ . Man findet

$$\begin{aligned} K(\tau, q', q) &= \langle q' | e^{-\tau H/\hbar} | q \rangle = \lim_{n \rightarrow \infty} \int dq_1 \cdots dq_{n-1} \left(\frac{m}{2\pi\hbar\epsilon} \right)^{n/2} e^{-S_E(q_0, q_1, \dots, q_n)/\hbar} \\ \text{mit} \quad S_E(\dots) &= \epsilon \sum_{j=0}^{n-1} \left\{ \frac{m}{2} \left(\frac{q_{j+1} - q_j}{\epsilon} \right)^2 + V(q_j) \right\}, \end{aligned} \quad (2.53)$$

wobei wieder $q_0 = q$ und $q_n = q'$ gesetzt wurden.

Die rechte Seite ist die Zustandssumme für ein System auf einem eindimensionalen Gitter, dessen Gitterpunkte mit j bezeichnet sind. Auf jedem Gitterpunkt j ist eine reell-wertige Variable q_j definiert und die Wechselwirkung ist eine zwischen nächsten Nachbarn q_j und q_{j+1} . Die Werte des Gitterfeldes

$$\{0, 1, \dots, n-1, n\} \longrightarrow \{q_0, q_1, \dots, q_{n-1}, q_n\}$$

werden am Rande des Gitters festgehalten, $q_0 = q$ und $q_n = q'$. Das vielfache Integral (2.53) entspricht der Summe über alle Gitterkonfigurationen. Mit dieser Interpretation wird \hbar zu einer Temperatur und der klassische Grenzfall $\hbar \rightarrow 0$ geht über in den Tieftemperaturlimites des Gittersystems.

Im Kontinuumslimes $n \rightarrow \infty$ wird die rechte Seite in (2.53) zu einem euklidischen Pfadintegral mit euklidischer Wirkung

$$S_E[q] = \int_0^\tau d\sigma \left[\frac{1}{2} m \dot{q}^2 + V(q(\sigma)) \right] \quad (2.54)$$

und positiven Kern

$$K(\tau, q', q) = \langle q' | e^{-\tau H/\hbar} | q \rangle = C \int_{q(0)=q}^{q(\tau)=q'} \mathcal{D}q e^{-S_E[q]/\hbar}. \quad (2.55)$$

Die Kerne für das freie Teilchen und den harmonischen Oszillator wurden bereits in (2.43) und (2.44) angegeben.

2.3.3 Pfadintegrale in der statistischen Mechanik

Die Pfadintegralformulierung führt unmittelbar zu einer Verbindung zwischen Quantenmechanik und statistischer Mechanik. Die Zustandssumme ist ein Pfadintegral mit imaginärer Zeit.

Die Spur des Operators $K(\tau) = \exp(-\tau H/\hbar)$, dessen Kern die Pfadintegraldarstellung (2.55) hat, ist gerade die kanonische *Zustandssumme* zur Temperatur $T = \hbar/\tau$ oder zur inversen Temperatur β ,

$$Z(\beta) = \text{tr} e^{-\beta H} = \sum e^{-\beta E_n} = \int dq K(\hbar\beta, q, q), \quad \beta = \frac{1}{T}. \quad (2.56)$$

Im auftretenden Kern K ist $q = q'$ und deshalb wird in dessen Pfadintegraldarstellung (2.55) nur über periodische Wege von q nach q integriert. Wegen der anschließenden Integration über q ergibt sich dann das Wegintegral über *alle periodischen Wege*,

$$Z(\beta) = C \oint \mathcal{D}q e^{-S_E[q]/\hbar}, \quad q(\hbar\beta) = q(0). \quad (2.57)$$

Im Folgenden setzen wir wieder $\hbar = 1$. Für den harmonischen Oszillator ist

$$K(\beta, q', q) = \sqrt{\frac{m\omega}{2\pi \sinh(\omega\beta)}} \exp \left\{ -\frac{m\omega}{2} \left[(q'^2 + q^2) \coth(\omega\beta) - \frac{2q'q}{\sinh(\omega\beta)} \right] \right\}, \quad (2.58)$$

und die Zustandssumme hat die Form

$$\begin{aligned} Z(\beta) &= \sqrt{\frac{m\omega}{2\pi \sinh(\omega\beta)}} \int dq \exp \left\{ -m\omega \tanh\left(\frac{1}{2}\omega\beta\right) q^2 \right\} \\ &= \frac{1}{2 \sinh(\frac{1}{2}\omega\beta)} = \frac{e^{-\frac{1}{2}\omega\beta}}{1 - e^{-\omega\beta}} = e^{-\frac{1}{2}\omega\beta} \sum_{n=0}^{\infty} e^{-n\omega\beta}, \end{aligned} \quad (2.59)$$

wobei wir $\sinh x = 2 \sinh x/2 \cdot \cosh x/2$ benutzten. Vergleichen wir mit (2.56), so können wir die Energien des harmonischen Oszillators mit Kreisfrequenz ω ablesen,

$$E_n = \omega \left(n + \frac{1}{2} \right), \quad n = 0, 1, \dots \quad (2.60)$$

Für große $\omega\beta$, d.h. für sehr tiefe Temperaturen, wird die Summe (2.56) vom Beitrag des Grundzustandes dominiert, und entsprechend konvergiert die *freie Energie* gegen die Grundzustandsenergie,

$$F(\beta) \equiv -\frac{1}{\beta} \log Z(\beta) \xrightarrow{\omega\beta \rightarrow \infty} E_0. \quad (2.61)$$

Oft ist man an den Energien und Wellenfunktionen der angeregten Zustände interessiert. Wir diskutieren nun eine elegante Methode zur Berechnung dieser Größen.

2.3.4 Korrelationsfunktionen in der Quantenstatistik

Die Energien der angeregten Zustände kann man aus den thermischen Korrelationsfunktionen zu imaginären Zeiten gewinnen. Dies sind Erwartungswerte von Produkten des Ortsoperators zu verschiedenen imaginären Zeiten,

$$q_E(\tau) = e^{\tau H/\hbar} q e^{-\tau H/\hbar}, \quad q_E(0) = q(0), \quad (2.62)$$

im kanonischen Ensemble,

$$\langle q_E(\tau_1) \cdots q_E(\tau_n) \rangle_\beta \equiv \frac{1}{Z(\beta)} \operatorname{tr} e^{-\beta H} q_E(\tau_1) \cdots q_E(\tau_n), \quad (2.63)$$

wobei $Z(\beta)$ die kanonische Zustandssumme ist. Am absoluten Temperaturnullpunkt gehen sie, wie wir gleich zeigen werden, in die Schwingerfunktionen über.

Die *Energielücke* zwischen dem Grundzustand und dem ersten angeregten Zustand kann man aus der thermischen Zweipunktfunktion

$$\begin{aligned} \langle q_E(\tau_1) q_E(\tau_2) \rangle_\beta &= \frac{1}{Z(\beta)} \operatorname{tr} e^{-\beta H} q_E(\tau_1) q_E(\tau_2) \\ &= \frac{1}{Z(\beta)} \operatorname{tr} e^{-(\beta-\tau_1)H} q e^{-(\tau_1-\tau_2)H} q e^{-\tau_2 H} \end{aligned} \quad (2.64)$$

wie folgt gewinnen: Zur Berechnung der Spur verwenden wir die orthonormierten Energie-Eigenzustände $|n\rangle$ und schieben den Einheitsoperator $\mathbb{1} = \sum |m\rangle\langle m|$ ein, mit dem Resultat

$$\langle \dots \rangle_\beta = \frac{1}{Z} \sum_{n,m} e^{-(\beta-\tau_1+\tau_2)E_n} e^{-(\tau_1-\tau_2)E_m} \langle n|q|m\rangle \langle m|q|n\rangle. \quad (2.65)$$

Für tiefe Temperaturen $\beta \rightarrow \infty$ sind die Terme mit E_n , $n \neq 0$ exponentiell unterdrückt und die thermische Zweipunktfunktion geht in die Schwingerfunktion über,

$$\langle q_E(\tau_1) q_E(\tau_2) \rangle_\beta \xrightarrow{\beta \rightarrow \infty} \sum_{m \geq 0} e^{-(\tau_1-\tau_2)(E_m-E_0)} |\langle 0|q|m\rangle|^2 = \langle 0|q_E(\tau_1) q_E(\tau_2)|0\rangle. \quad (2.66)$$

Ganz analog findet man für die Einpunktfunktion

$$\lim_{\beta \rightarrow \infty} \langle q_E(\tau) \rangle_\beta = \langle 0|q|0\rangle. \quad (2.67)$$

Die *verbundene Zweipunktfunktion*

$$\langle q_E(\tau_1) q_E(\tau_2) \rangle_{c,\beta} \equiv \langle q_E(\tau_1) q_E(\tau_2) \rangle_\beta - \langle q_E(\tau_1) \rangle_\beta \langle q_E(\tau_2) \rangle_\beta \quad (2.68)$$

wird für große Zeitunterschiede $\tau_1 - \tau_2$ exponentiell klein,

$$\lim_{\beta \rightarrow \infty} \langle q_E(\tau_1) q_E(\tau_2) \rangle_{c,\beta} = \sum_{m > 0} e^{-(\tau_1-\tau_2)(E_m-E_0)} |\langle 0|q|m\rangle|^2, \quad (2.69)$$

da im Gegensatz zur Zweipunktfunktion der Term mit $m = 0$ nicht vorkommt. Die

verbundene Zweipunktfunktion ist die Zweipunktfunktion für den verschobenen Ortsoperator,

$$\langle q_E(\tau_1)q_E(\tau_2) \rangle_{c,\beta} \equiv \langle \Delta q_E(\tau_1)\Delta q_E(\tau_2) \rangle_\beta \quad \Delta q_E(\tau) = q_E(\tau) - \langle q_E(\tau) \rangle_\beta. \quad (2.70)$$

In der Störungstheorie tragen nur verbundene Feynmangraphen zu $\langle \dots \rangle_c$ bei. Für große euklidische Zeitdifferenzen $\tau_1 - \tau_2$ kann man nun die Energielücke und den Betrag des Matrixelementes $\langle 0|q|1 \rangle$ leicht ablesen,

$$\langle q_E(\tau_1)q_E(\tau_2) \rangle_{c,\beta \rightarrow \infty} \longrightarrow e^{-(E_1 - E_0)(\tau_1 - \tau_2)} |\langle 0|q|1 \rangle|^2, \quad \tau_1 - \tau_2 \rightarrow \infty. \quad (2.71)$$

Als nächstes leiten wir die Pfadintegraldarstellung für die thermischen Korrelationsfunktionen ab. Wir lassen eine Zeitabhängigkeit von H zu. Wie beim Zeitentwicklungsoperator berechnen wir zuerst das Matrixelement

$$\langle q'|K(\beta)q_E(\tau_1)q_E(\tau_2)|q \rangle, \quad \text{mit} \quad q_E(\tau) = K(-\tau)qK(\tau). \quad (2.72)$$

Hierin ist $K(\tau)$ der euklidische Propagator, dessen Kern die Pfadintegraldarstellung (2.55) hat. Wir schieben zweimal die Eins ein, so daß

$$\langle \dots \rangle = \int dvdu \langle q'|K(\beta - \tau_1)|v \rangle v \langle v|K(\tau_1 - \tau_2)|u \rangle u \langle u|K(\tau_2)|q \rangle.$$

Setzen wir für die Propagatoren das Resultat (2.55) ein, dann ist die Pfadintegraldarstellung der thermischen Zweipunktfunktion evident: Zuerst summieren wir über alle Wege von $q \rightarrow u$ in der „imaginären“ Zeit τ_2 und anschließend multiplizieren wir mit der Koordinate u zur Zeit τ_2 . Danach summieren wir über alle Wege $u \rightarrow v$ in der Zeit $\tau_1 - \tau_2$ und multiplizieren mit der Koordinate v zur Zeit τ_1 . Zum Schluß summieren wir noch über alle Wege $v \rightarrow q'$ in der Zeit $\beta - \tau_1$. Die Integration über die Zwischenorte u und v bedeutet, daß über *alle* Wege $q \rightarrow q'$ summiert wird und nicht nur über Wege die zur Zeit τ_2 durch u und zur Zeit τ_1 durch v gehen. Neben $\exp(-S_E)$ enthält der Integrand den Faktor $vu = q(\tau_1)q(\tau_2)$. Die gesamte Zeit ist β , so daß schlussendlich

$$\langle q'|e^{-\beta \hat{H}} \hat{q}_E(\tau_1) \hat{q}_E(\tau_2)|q \rangle = C \cdot \int_{q(0)=q}^{q(\beta)=q'} \mathcal{D}q e^{-S_E[q]} q(\tau_1)q(\tau_2), \quad \tau_1 > \tau_2. \quad (2.73)$$

Zur Berechnung der Spur im thermischen Erwartungswert (2.64) setzen wir $q = q'$, integrieren über q und dividieren das Resultat durch die Zustandssumme $Z(\beta)$. Im Pfadintegral bedeutet $q = q'$ und das Integral über q , daß wir über alle periodischen

Wege mit Periode β summieren,

$$\begin{aligned}\langle \hat{q}_E(\tau_1) \hat{q}_E(\tau_2) \rangle_\beta &= \frac{1}{Z(\beta)} \oint \mathcal{D}q \exp(-S_E[q]) q(\tau_1) q(\tau_2), \\ Z &= \oint \mathcal{D}q \exp(-S_E[q]).\end{aligned}\quad (2.74)$$

Bei der Anwendung der Trotter-Formel haben wir $\tau_1 > \tau_2$ vorausgesetzt.

Die Pfadintegraldarstellung für die höheren zeitgeordneten thermischen Korrelationsfunktionen erhält man analog. Sie können aus dem erzeugenden Kern

$$Z(\beta, j, q', q) = C \int_{q(0)=q}^{q(\beta)=q'} \mathcal{D}q e^{-S_E[q] + \int j(\tau)q(\tau)}, \quad (2.75)$$

oder dem zugehörigen erzeugenden Funktional, der Zustandssumme in Gegenwart einer äußeren Quelle,

$$Z(\beta, j) = \int dq Z(\beta, j, q, q) = C \oint_{q(0)=q(\beta)} \mathcal{D}q e^{-S_E[q] + \int j(\tau)q(\tau)}, \quad (2.76)$$

gewonnen werden. Man braucht diese nur genügend oft nach der Quelle $j(\tau)$ abzuleiten. So ist die thermische Zweipunktfunktion (2.64) gleich

$$\langle T \hat{q}_E(\tau_1) \hat{q}_E(\tau_2) \rangle_\beta = \frac{1}{Z(\beta, 0)} \frac{\delta^2}{\delta j(\tau_1) \delta j(\tau_2)} Z(\beta, j) \Big|_{j=0}, \quad (2.77)$$

wobei T für die Zeitordnung steht. Beide Seiten stimmen für $\tau_1 > \tau_2$ überein und da die rechte Seite symmetrisch in den Zeitargumenten ist, müssen wir auf der linken Seite die Zeitordnung einschieben. Wir erhielten die Zeitordnung natürlich auch wenn wir die obige Rechnung für $\tau_2 > \tau_1$ wiederholten.

Die *verbundenen Korrelationsfunktionen* werden vom Logarithmus der Zustandssumme, dem *Schwingerfunktional*

$$W(\beta, j) = \log Z(\beta, j) \quad (2.78)$$

erzeugt. Für ein konservatives System mit zeitunabhängiger Quelle j ist W proportional zur freien Energie. Die verbundenen Korrelationsfunktionen erhält man durch funktionale Ableitungen des Funktionals,

$$\langle T \hat{q}_E(\tau_1) \hat{q}_E(\tau_2) \cdots \hat{q}_E(\tau_n) \rangle_{c,\beta} = \frac{\delta^n}{\delta j(\tau_1) \cdots \delta j(\tau_n)} W(\beta, j)|_{j=0}. \quad (2.79)$$

2.4 Anhang A: Der harmonische Oszillator

Nach Diskretisierung der euklidischen Zeit lautet die Pfadintegraldarstellung für die Zustandssumme des harmonischen Oszillators mit Lagrangefunktion

$$L = \frac{m}{2} \dot{q}^2 + \mu q^2 \quad (A.1)$$

auf dem Gitter mit Gitterkonstanten ϵ und n Stützstellen wie folgt,

$$\begin{aligned} Z &= \int dq_1 \cdots dq_n \left(\frac{m}{2\pi\epsilon} \right)^{n/2} \exp \left\{ -\epsilon \sum_{j=0}^{n-1} \left[\frac{m}{2} \left(\frac{q_{j+1} - q_j}{\epsilon} \right)^2 + \mu q_j^2 \right] \right\} \\ &= \left(\frac{m}{2\pi\epsilon} \right)^{n/2} \int dq_1 \cdots dq_n \exp \left(-\frac{1}{2} (\mathbf{q}, A \mathbf{q}) \right). \end{aligned} \quad (A.2)$$

Im ersten Integral ist $q_0 = q_n$ und im zweiten haben wir die reguläre symmetrische Matrix

$$A = \frac{m}{\epsilon} \begin{pmatrix} \alpha & -1 & 0 & \cdots & 0 & -1 \\ -1 & \alpha & -1 & \cdots & 0 & 0 \\ & & & \ddots & & \\ & & & & \ddots & -1 \\ -1 & 0 & 0 & \cdots & -1 & \alpha \end{pmatrix}, \quad \alpha = 2 \left(1 + \frac{\mu}{m} \epsilon^2 \right), \quad (A.3)$$

eingeführt. Dies ist eine *Toeplitz-Matrix* mit denselben Elementen in jeder Nebendiagonalen. Diese Eigenschaft folgt aus der Invarianz der Wirkung unter Gittertranslationen.

Zur Berechnung von Momenten ist es vorteilhaft, von der *erzeugenden Funktion*

$$\begin{aligned} Z[j] &= \left(\frac{m}{2\pi\epsilon} \right)^{n/2} \int d^n q \exp \left\{ -\frac{1}{2} (\mathbf{q}, A \mathbf{q}) + (\mathbf{j}, \mathbf{q}) \right\} \\ &= \frac{(m/\epsilon)^{n/2}}{\sqrt{\det A}} \exp \left\{ \frac{1}{2} (\mathbf{j}, A^{-1} \mathbf{j}) \right\} \end{aligned} \quad (A.4)$$

Gebrauch zu machen. Hier haben wir die als bekannt vorausgesetzte Formel für Gauß-

sche Integrale zur Anwendung gebracht. Die Eigenwerte von A sind

$$\lambda_k = \frac{m}{\epsilon} \left(\alpha - 2 \cos \frac{2\pi}{n} k \right) = \frac{2}{\epsilon} \left(\mu \epsilon^2 + 2m \sin^2 \frac{\pi k}{n} \right), \quad k = 1, \dots, n, \quad (\text{A.5})$$

und die zugehörigen orthonormierten Eigenvektoren haben die Form

$$\psi(k) = \frac{1}{\sqrt{n}} (z^k, z^{2k}, \dots, z^{nk})^T \quad \text{mit} \quad z = e^{2\pi i/n}. \quad (\text{A.6})$$

Damit ergibt sich für die inverse Matrix

$$A^{-1} = \sum_k \frac{\psi(k)\psi^\dagger(k)}{\lambda_k} \quad \text{bzw.} \quad (A^{-1})_{pq} = \frac{\epsilon}{2n} \sum_{k=1}^n \frac{e^{2\pi i k(p-q)/n}}{\mu \epsilon^2 + 2m \sin^2 \frac{\pi k}{n}}. \quad (\text{A.7})$$

Die verbundenen Korrelationsfunktionen des Oszillators

$$\langle q_{i_1} \cdots q_{i_m} \rangle = \frac{\partial^m}{\partial j_{i_1} \cdots \partial j_{i_m}} \log Z[j] \Big|_{j=0} \quad (\text{A.8})$$

verschwinden für $m > 2$. Die einzige nicht-verschwindende Funktion ist

$$\langle q_i q_j \rangle_c = \langle q_i q_j \rangle = \frac{\partial^2}{\partial j_i \partial j_j} (\mathbf{j}, A^{-1} \mathbf{j}) = (A^{-1})_{ij}. \quad (\text{A.9})$$

Es folgt insbesondere, daß unabhängig von i gilt

$$\langle q_i^2 \rangle = \frac{\epsilon}{2n} \sum_{k=1}^n \frac{1}{\mu \epsilon^2 + 2m \sin^2 \frac{\pi k}{n}}. \quad (\text{A.10})$$

Zusammen mit dem Virialtheorem führt dieses Resultat auf die Grundzustandsenergie E_0 des Oszillators auf dem endlichen Gitter. Die entsprechenden Energien sind für verschiedene ϵ und n mit $\epsilon n = 10$ in der Tabelle (4.50) im nächsten Kapitel unter E_0 (exakt) zu finden.

2.5 Aufgaben

Aufgabe 1: Gaußsches Integral

Zeigen Sie

$$\int dz_1 d\bar{z}_1 \dots dz_n d\bar{z}_n \exp\left(-\sum_{ij} \bar{z}_i A_{ij} z_j\right) = \pi^n (\det A)^{-1},$$

wobei A eine positive definite hermitesche $n \times n$ Matrix ist, und es sich bei den z_i um komplexe Integrationsvariablen handelt.

Aufgabe 2: Harmonischer Oszillator

Leiten Sie die in der Vorlesung verwendete Formel für den Kern $K(t, q', q) = \langle q' | e^{-iHt} | q \rangle$ des Zeitentwicklungsoperators des harmonischen Oszillators

$$H = \frac{1}{2} (p^2 + x^2)$$

her. Hier wurde zur Vereinfachung $\hbar = m = \omega = 1$ gesetzt. Drücken Sie dazu den Kern mittels Eigenfunktionen von H aus und verwenden Sie

$$\exp(-(\xi^2 + \eta^2)) \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\zeta^n}{2^n n!} H_n(\xi) H_n(\eta) = \frac{1}{\sqrt{1-\zeta^2}} \exp\left(\frac{-(\xi^2 + \eta^2 - 2\xi\eta\zeta)}{1-\zeta^2}\right).$$

Dabei sind H_n die Hermitefunktionen, d.h. die Eigenfunktionen von H .

Bemerkung: Dieses Ergebnis kann auch über die direkte Auswertung des Pfadintegrals erhalten werden (siehe mein Vorlesungsskript *Path Integrals*, Seite 14-17).

Aufgabe 3: Freies Teilchen auf S^1

Ein freies Teilchen bewege sich in einer eindimensionalen „Box“ mit periodischen Randbedingungen. Berechnen Sie für das Teilchen den Zeitentwicklungskern $K(t_b - t_a, q_b, q_a) = \langle q_b, t_b | q_a, t_a \rangle$. Verwenden Sie die bekannte Formel für den Zeitentwicklungskern des freien Teilchens, und versuchen Sie die durch die Randbedingungen eingeschränkten Pfade durch eine Summe von nicht eingeschränkten Pfaden auszudrücken.

Aufgabe 4: Verbundene und unverbundene Korrelationsfunktionen

In der Vorlesung wurde folgende Formel für die unverbundenen thermischen Korre-

lationsfunktionen abgeleitet:

$$\langle T \hat{q}_E(\tau_1) \dots \hat{q}_E(\tau_n) \rangle_\beta = \frac{1}{Z(\beta)} \frac{\delta^n}{\delta j(\tau_1) \dots \delta j(\tau_n)} \oint \mathcal{D}q \exp \left(-S_E[q] + \int_0^\beta j(\tau) q(\tau) \right) \Big|_{j=0},$$

wobei über β -periodische Wege integriert wird. Nehmen Sie an, daß in der euklidischen Lagrangedichte $\mathcal{L}_E(q, \dot{q}) = \frac{1}{2}\dot{q}^2 + V(q)$ das Potential gerade ist, d.h. $V(-q) = V(q)$ gilt.

a) Zeigen Sie, daß $\langle \hat{q}_E(\tau) \rangle_\beta = 0$ ist.

b) Drücken sie die unverbundene 4-Punktfunktion $\langle T \hat{q}_E(\tau_1) \dots \hat{q}_E(\tau_4) \rangle_\beta$ durch verbundene Korrelationsfunktionen aus.

Aufgabe 5: Semiklassische Entwicklung der Verteilungsfunktion

In der Vorlesung wurde gezeigt, dafür die thermische Zustandssumme folgende Pfadintegraldarstellung hat,

$$Z(\beta) = C \int dq \int_{q(0)=q}^{q(\hbar\beta)=q} \mathcal{D}q e^{-S_E[q]/\hbar}.$$

Nach Reskalierung der imaginären Zeit und der Amplitude gemäß

$$\tau \longrightarrow \hbar\tau \quad \text{and} \quad q(\cdot) \longrightarrow \hbar q(\cdot)$$

hat das „Zeitintervall“ die Länge β anstelle von $\hbar\beta$ und

$$Z(\beta) = C \cdot \int dq \int_{q(0)=q/\hbar}^{q(\beta)=q/\hbar} \mathcal{D}q \exp \left[- \int_0^\beta \left\{ \frac{1}{2} m \dot{q}^2 + V(\hbar q(\cdot)) \right\} d\tau \right].$$

Die kinetische Energie dominiert das Potential für kleine \hbar solange das Teilchen nicht ruht. Zerlege nun den Weg in eine konstanten Anteil ohne kinetische Energie und Fluktuationen um diesen Weg, $q(\cdot) = q/\hbar + \xi(\cdot)$. Zeige, dass

$$Z(\beta) = C \cdot \frac{1}{\hbar} \int dq \int_{\xi(0)=0}^{\xi(\beta)=0} \mathcal{D}\xi \exp \left[- \int_0^\beta \left\{ \frac{1}{2} m \dot{\xi}^2 + V(q + \hbar\xi) \right\} d\tau \right].$$

Die Konstante C ist so zu wählen, dass sich für ein freies Teilchen mit $V = 0$ das bekannte Resultat $Z(\beta, q, q) = (m/2\pi\beta\hbar^2)^{1/2}$ ergibt. Entwickle nun $\exp(-\int V)$ in Po-

tenzen von \hbar und beweise das Zwischenresultat

$$Z = C \cdot \frac{1}{\hbar} \int dq e^{-\beta V(q)} \int_{\xi(0)=0}^{\xi(\beta)=0} \mathcal{D}\xi e^{-\frac{1}{2}m \int d\tau \dot{\xi}^2} \cdot \left[1 - \hbar V' \int \xi(\tau) - \frac{1}{2} \hbar^2 \{ V'' \int \xi^2(\tau) - (V')^2 \int \xi(\tau) \int \xi(s) \} + \dots \right],$$

wobei das Argument von V, V', \dots gleich q ist. Bedingte Erwartungswerte wie

$$\langle \xi(\sigma_1) \xi(\sigma_2) \rangle = \langle \xi(\sigma_2) \xi(\sigma_1) \rangle = C \cdot \int_{\xi(0)=0}^{\xi(\beta)=0} \mathcal{D}\xi e^{-\frac{1}{2}m \int d\tau \dot{\xi}^2} \xi(\sigma_1) \xi(\sigma_2)$$

können durch Differenzieren des erzeugenden Funktionals

$$C \int_{\xi(0)=0}^{\xi(\beta)=0} \mathcal{D}\xi e^{-\frac{1}{2}m \int d\tau \dot{\xi}^2 + \int d\tau j \xi} = \frac{m}{2\pi\beta} \exp \left(\frac{1}{m\beta} \int_0^\beta d\sigma_1 \int_0^{\sigma_1} d\sigma_2 (\beta - \sigma_1) \sigma_2 j(\sigma_1 j(\sigma_2)) \right)$$

berechnet werden. Beweisen sie diese Formel für das erzeugende Funktional und berechnen Sie die führende Ordnung der semiklassischen Entwicklung sowie die erste Korrektur.

Aufgabe 6: Hochtemperaturentwicklung der Zustandssumme

Wir untersuchen die Temperaturabhängigkeit der Zustandssumme interessiert und dürfen $\hbar = 1$ setzen. Wiederholen Sie die obige Rechnung, allerdings mit den Reskalierungen

$$\tau \longrightarrow \beta\tau \quad \text{und} \quad \xi \longrightarrow \sqrt{\beta}\xi,$$

so dass die β -Abhängigkeit nur vom Potential herrührt,

$$Z(\beta) = \frac{C}{\sqrt{\beta}} \int dq \int_{\xi(0)=0}^{\xi(1)=0} \mathcal{D}\xi \exp \left[- \int_0^1 \left\{ \frac{1}{2} m \dot{\xi}^2 + \beta V(q + \sqrt{\beta}\xi) \right\} d\tau \right].$$

Entwickeln Sie in Potenzen der inversen Temperatur β . Um die entstehenden Korrelationsfunktionen zu berechnen benutze man das erzeugende Funktional in der vorherigen Aufgabe für $\beta = 1$. Die verbleibenden Integrale über die Korrelationsfunktionen können relativ leicht ausgeführt werden. Bestimmen Sie die Terme der

Ordnungen $T^{1/2}$, $T^{-1/2}$ und $T^{-3/2}$ in der Hochtemperaturentwicklung von $Z(\beta)$.

Kapitel 3

Hochdimensionale Integrale

Das Pfadintegral kann nur für sehr einfache Systeme wie den harmonischen Oszillator oder das freie Teilchen explizit berechnet werden. Für kompliziertere Systeme macht man Gebrauch von Störungstheorien (z.B. semiklassische Entwicklung, Störungstheorie in der Wechselwirkung, Hochtemperaturentwicklung) oder numerischen Methoden. Wir haben gesehen, dass die Pfadintegrale für thermodynamische Größen und Korrelationsfunktionen durch endlichdimensionale Integrale approximiert werden. Dabei wird die Zeit diskretisiert, $s \in \{0, \epsilon, \dots, n\epsilon = \tau\}$, und die Wirkung durch eine Riemannsche Summe genähert. Diese hängt von den Werten

$$\mathbf{q} = \{q_0, q_1, \dots, q_n\} = \{q(0), q(\epsilon), \dots, q(n\epsilon)\}$$

des Weges $q(s)$ an den Gitterpunkten $s_k = k\epsilon$ ab. In dieser Gitterapproximation ist jeder Erwartungswert durch ein endlich-dimensionales Integral gegeben,

$$\langle O \rangle = \frac{\int \mathcal{D}\mathbf{q} O(\mathbf{q}) e^{-S(\mathbf{q})}}{\int \mathcal{D}\mathbf{q} e^{-S(\mathbf{q})}}, \quad \text{mit} \quad \int \mathcal{D}\mathbf{q} = \int_{-\infty}^{\infty} \prod_1^n dq_j, \quad (3.1)$$

mit der in (2.53) eingeführten euklidischen Gitterwirkung $S(\mathbf{q}) = S(q_1, \dots, q_n)$ (statt S_E schreiben wir in diesem Abschnitt S).

3.1 Hochdimensionale Integrale

Nicht nur in Quantenstatistik, Festkörperphysik, euklidischen Quantenfeldtheorie, Hochenergiephysik oder anderen Teilgebieten der Physik und Chemie gilt es hochdimensionale Integrale möglichst effizient zu berechnen und dabei den Fluch der Dimension zu vermeiden. Zum Beispiel lässt sich der Erwartungswert von Zinsderivativen als

hochdimensionales Integral schreiben. Bei einer Laufzeit von 30 Jahren zu je 12 Monaten und Verwendung eines eigenen Zinssatzes für jeden Monat handelt es sich hier um 360-dimensionale Integrale. Integrale von noch viel höherer Dimension sind in Physik und Chemie nicht ungewöhnlich. Hier sind effiziente Algorithmen gefragt, die derartige Integrale bis auf einen abschätzbaren Fehler berechnen.

3.1.1 Numerische Algorithmen

Numerische Integrationsmethoden werden seit Jahrhunderten benutzt. Es gibt zwei bekannte Kategorien: Formeln, welche den Integrand an äquidistanten Stützstellen auswerten (Newton-Cotes Integrationsregeln) und Formeln, welche den Integranden an sorgfältig ausgewählten, aber nicht äquidistanten Stützstellen auswerten (Gaußsche Integrationsregeln). Für spezielle Integranden führt die zweite Klasse meistens zu besseren Resultaten.

Die numerischen Algorithmen beruhen auf der Riemannschen Definition von Integralen. Um nachzuprüfen, ob ein Funktion $f : [a, b] \rightarrow \mathbb{R}$ Riemann-integrierbar ist, wähle man eine Einteilung des Intervalls,

$$\gamma : a = x_0 < x_1 < x_2 < \dots < x_{n-2} < x_{n-1} < x_n = b \quad (3.2)$$

und definiert die zu dieser Einteilung gehörende Riemannsche Unter- und Obersumme

$$\begin{aligned} U(f, \gamma) &= \sum_{i=0}^{n-1} (x_{i+1} - x_i) \cdot \inf\{f(x) | x_i \leq x \leq x_{i+1}\} \\ O(f, \gamma) &= \sum_{i=0}^{n-1} (x_{i+1} - x_i) \cdot \sup\{f(x) | x_i \leq x \leq x_{i+1}\}, \end{aligned}$$

mit $O(f, \gamma) \geq U(f, \gamma)$. Ist

$$\sup_{\gamma} U(f, \gamma) = \inf_{\gamma} O(f, \gamma),$$

dann heißt f im Riemannschen Sinne integrierbar und

$$\int_a^b f(x) dx \equiv \sup_{\gamma} U(f, \gamma) \quad (3.3)$$

das *Riemannsche Integral* von f . Diese Definition kann leicht auf mehrdimensionale Integrale ausgedehnt werden und wird bei numerischen Rechnungen gebraucht.

Die meisten Algorithmen beruhen darauf, dass jede glatte Funktion durch *Interpolationspolynome* approximiert werden kann. Wir erinnern daran, dass es genau ein Polynom P_m vom Grade $\leq m$ gibt, welches an $(m + 1)$ vorgegebenen Stützstellen $x_0, x_1, \dots, x_{m-1}, x_m$ vorgegebene Werte f_0, \dots, f_m annimmt, wobei $f_i = f(x_i)$ ist. Zur expliziten Konstruktion definiert man die $m + 1$ *Lagrangeschen Polynome* vom Grade m :

$$L_p^{(m)}(x) = \prod_{\substack{i=0 \\ i \neq p}}^m \frac{x - x_i}{x_p - x_i}, \quad p = 0, \dots, m, \quad \text{mit} \quad L_p^{(m)}(x_q) = \delta_{pq}. \quad (3.4)$$

Das interpolierende Polynom vom Grade m ist dann

$$P_m(x) = \sum_{p=0}^m f(x_p) L_p^{(m)}(x). \quad (3.5)$$

Es gilt nun der folgende

Satz: *Es sei f eine auf dem Intervall Δ $(m + 1)$ -mal stetig differenzierbare Funktion, und sei P_m das zu den Stützstellen $x_0, \dots, x_m \in \Delta$ gehörige Interpolationspolynom vom Grade $\leq m$. Dann existiert zu jedem $x \in \Delta$ ein Punkt $\xi(x)$ (gelegen im kleinsten Intervall, welches die Punkte (x_0, \dots, x_m, x) enthält) derart, dass*

$$f(x) - P_m(x) = \frac{f^{(m+1)}(\xi(x))}{(m + 1)!} L^{(m)}(x), \quad L^{(m)}(x) = \prod_{i=0}^m (x - x_i). \quad (3.6)$$

Aufgrund des Satzes ergibt sich für das Integral $\int dx f(x)$ von der kleinsten bis zur größten Stützstelle die Formel

$$\int_{x_0}^{x_m} dx f(x) = \sum_{p=0}^m f(x_p) \underbrace{\int dx L_p^{(m)}(x)}_{\gamma_p^{(m)}} + \int dx \frac{f^{(m+1)}(\xi(x))}{(m + 1)!} L^{(m)}(x). \quad (3.7)$$

Die $\gamma_p^{(m)}$ heißen Gewichte und die x_p Knoten der Integrationsformel. Für äquidistante Knoten an den Stellen

$$x_0, x_1 = x_0 + \epsilon, x_2 = x_0 + 2\epsilon, \dots, x_m = x_0 + m\epsilon \quad (3.8)$$

erhalten wir mit der Substitution $x = x_0 + \epsilon t$, $t \in [0, m]$ die Gewichte

$$\gamma_p^{(m)} = \epsilon \int_0^m \prod_{\substack{i=0 \\ i \neq p}}^m \frac{t-i}{p-i} dt := \epsilon w_p^{(m)} = \epsilon w_{m-p}^{(m)}, \quad p = 0, 1, \dots, m. \quad (3.9)$$

Wenden wir das allgemeine Resultat (3.7) auf die konstante Funktion $f = 1$ an, so ergibt sich die Summenformel $\sum_p \gamma_p^{(m)} = m\epsilon$ oder auch

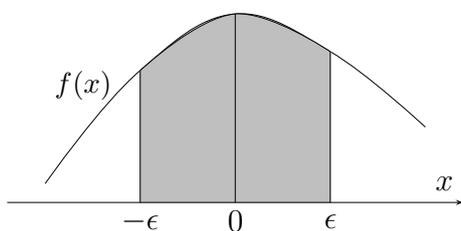
$$w_0^{(m)} + w_1^{(m)} + \dots + w_m^{(m)} = m. \quad (3.10)$$

Die Newton-Cotes-Formeln lauten nun

$$\int_{x_0}^{x_m} dx f(x) \sim \sum_{p=0}^m \epsilon w_p^{(m)} f(x_0 + \epsilon p), \quad x_m = x_0 + m\epsilon. \quad (3.11)$$

Man findet folgende Gewichte

m	Name	$w_p^{(m)}$ ($p = 0, 1, \dots, m$)						
0	Rechteckregel	1						
1	Trapezregel	$\frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}$					
2	Simpson-Regel	$\frac{1}{3}$	$\frac{4}{3}$	$\frac{1}{3}$				
3	3/8 – Regel	$\frac{3}{8}$	$\frac{9}{8}$	$\frac{9}{8}$	$\frac{3}{8}$			
4	Milne-Regel	$\frac{14}{45}$	$\frac{64}{45}$	$\frac{24}{45}$	$\frac{64}{45}$	$\frac{14}{45}$		
5		$\frac{95}{288}$	$\frac{375}{288}$	$\frac{250}{288}$	$\frac{250}{288}$	$\frac{375}{288}$	$\frac{95}{288}$	
6	Weddle-Regel	$\frac{41}{140}$	$\frac{216}{140}$	$\frac{27}{140}$	$\frac{272}{140}$	$\frac{27}{140}$	$\frac{216}{140}$	$\frac{41}{140}$

(3.12)


Wir illustrieren die Fehleranalyse für die Simpson-Regel. Dazu betrachten wir die Differenz zwischen dem Integral der Funktion $f(x)$ von $-\epsilon$ bis ϵ (siehe Abbildung) und der Näherung (3.11) für $m = 2$, also den Fehler

$$E_2(\epsilon) = \int_{-\epsilon}^{\epsilon} dx f(x) - \frac{\epsilon}{3} (f(-\epsilon) + 4f(0) + f(\epsilon)).$$

Wir leiten $E_2(\epsilon)$ dreimal nach ϵ ab und erhalten

$$E_2'''(\epsilon) = -\frac{\epsilon}{3}(-f'''(-\epsilon) + f'''(\epsilon)).$$

Dies kann betragsmäßig wie folgt abgeschätzt werden:

$$|E_2'''(\epsilon)| = \frac{\epsilon}{3}|f'''(\epsilon) - f'''(-\epsilon)| \leq \frac{2\epsilon}{3}M_3 \quad \text{mit} \quad M_3 = \sup_{t \in [-\epsilon, \epsilon]} |f'''(t)|.$$

Die Integration ergibt die Fehlerabschätzung

$$|E_2(\epsilon)| \leq M_3 \cdot \frac{\epsilon^4}{36}. \tag{3.13}$$

Falls die Funktion f mindestens viermal stetig differenzierbar ist, kann man auf E_2''' den Mittelwertsatz anwenden,

$$E_2'''(\epsilon) = \frac{2\epsilon}{3}\epsilon \cdot f^{(4)}(\xi),$$

und es folgt die verbesserte Abschätzung

$$|E_2(\epsilon)| \leq M_4 \cdot \frac{\epsilon^5}{90} \quad \text{mit} \quad M_4 = \sup_{t \in [-\epsilon, \epsilon]} |f^{(4)}(t)|. \tag{3.14}$$

Hieraus ergibt sich die bemerkenswerte Tatsache, dass durch die *Keplersche Fassregel* sogar kubische Polynome exakt integriert werden. Für die anderen Verfahren erhält man analoge Fehlerschranken für das Integral von der kleinsten bis zur größten Stützstelle ($M_m = \sup_{[x_0, x_m]} |f^{(m)}|$):

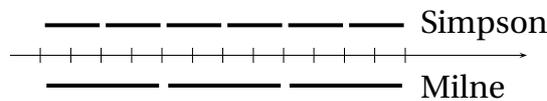
m	Name	$E_m(\epsilon)$	m	Name	$E_m(\epsilon)$
0	Rechteckregel	$\frac{1}{2} \epsilon^2 M_1$	4	Milne-Regel	$\frac{8}{945} \epsilon^7 M_6$
1	Trapezregel	$\frac{1}{12} \epsilon^3 M_2$	5		$\frac{275}{12096} \epsilon^7 M_6$
2	Simpson-Regel	$\frac{1}{90} \epsilon^5 M_4$	6	Weddle-Regel	$\frac{9}{1400} \epsilon^9 M_8$
3	3/8 – Regel	$\frac{3}{80} \epsilon^5 M_4$			

(3.15)

Allgemein gilt, dass für gerade m sogar Polynome vom Grad $m+1$ exakt integriert werden. Für große m werden die Koeffizienten in den Newton-Cotes Formeln allerdings gross und haben wechselnde Vorzeichen. Dies führt zu Differenzen grosser Zahlen und auch deshalb werden die Newton-Cotes Verfahren höherer Ordnung in der Pra-

xis kaum eingesetzt. Für nicht genügend oft differenzierbare Funktionen können die auf Interpolationspolynomen beruhenden Methoden völlig falsche Resultate liefern!

Zusammengesetzte Integrationsformeln: Indem das Integrationsintervall, über das die Funktion f integriert werden soll, in kleinere, gleich große Teilintervalle zerlegt wird, gelangt man zum Rechteck-, Trapez-, Simpson- oder den höheren Integrationsverfahren. Die Anzahl Intervalle sollte ein Vielfaches von m sein. Zum Beispiel wird beim Simpsonverfahren die Keplersche Fassregel auf Doppelintervalle angewandt.



Wir betrachten die zusammengesetzte Simpsonregel etwas näher. Das Integrationsintervall $[a, b] = [x_0, x_{2n}]$ enthalte $2n$ Teilintervalle der Länge ϵ , $b - a = 2n\epsilon$. Die $2n + 1$ Stützstellen sind $x_j = a + \epsilon j$, $j = 0, 1, \dots, 2n$. Das Integral wird approximiert durch

$$\begin{aligned}
 S_2(f) &\approx \frac{\epsilon}{3} \left(\{f(x_0) + 4f(x_1) + f(x_2)\} + \{f(x_2) + 4f(x_3) + f(x_4)\} + \dots \right. \\
 &\quad \left. \dots + \{f(x_{2n-2} + 4f(x_{2n-1}) + f(x_{2n})\} \right) \\
 &= \frac{\epsilon}{3} \left(f(x_0) + 4 \sum_{j=0}^{n-1} f(x_{2j+1}) + 2 \sum_{j=1}^{n-1} f(x_{2j}) + f(x_{2n}) \right).
 \end{aligned}$$

Der Fehler kann wie folgt abgeschätzt werden

$$\left| \int_a^b f(x) dx - S_2(f) \right| \leq \frac{1}{90} \epsilon^5 \cdot n \underbrace{\sup_{t \in [a,b]} f^{(4)}(t)}_{M_4} = \frac{b-a}{180} \epsilon^4 M_4. \tag{3.16}$$

Allgemeiner gilt für eine äquidistante Einteilung des Integrationsintervalls in $m \cdot n$ Teilintervalle, so dass $b - a = (mn)\epsilon$ ist, die Abschätzung

$$\left| \int_a^b f(x) dx - S_m(f) \right| \leq \frac{b-a}{m\epsilon} E_m(\epsilon) \tag{3.17}$$

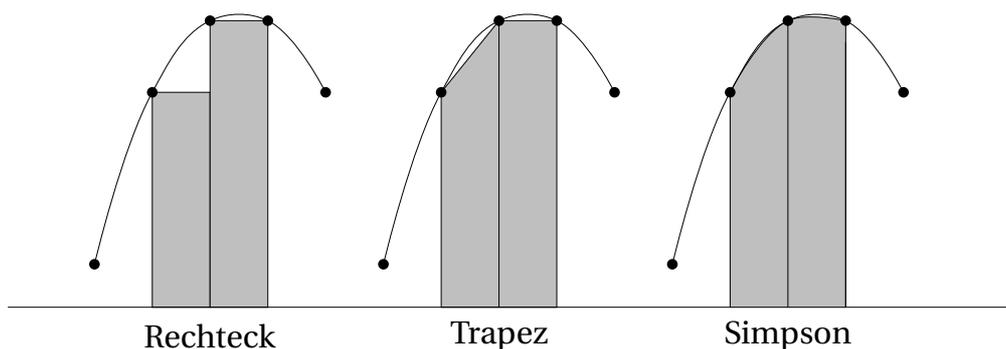
mit $E_m(\epsilon)$ aus (3.15). Dabei ist natürlich $M_m = \sup_{[a,b]} f^{(m)}$.

Mit Hilfe eines C-Programms berechnen wir das Integral einer Funktion über das Intervall $[a, b]$ und zwar auf vier Arten: mit dem Rechteck-, Trapez- und Simpsonver-

fahren sowie mit Hilfe der Monte-Carlo Methode. Das letzte Verfahren wird weiter unten besprochen. Nochmals zur Erinnerung:

$$\begin{aligned}
 \text{Rechteckregel : } & \sum_{i=0,1,2}^{n-1} \epsilon f(x_i) \\
 \text{Trapezregel : } & \sum_{i=0,1,2}^{n-1} \frac{\epsilon}{2} (f(x_i) + f(x_{i+1})) \\
 \text{Simpson-Methode : } & \sum_{i=0,2,4}^{n-2} \frac{\epsilon}{3} (f(x_i) + 4f(x_{i+1}) + f(x_{i+2})).
 \end{aligned} \tag{3.18}$$

In der letzten Formel soll n eine gerade Zahl sein. Die Näherungen sind in der folgenden Figur skizziert.



Das Programm `1dintegral.c` auf Seite 50 berechnet das Integral $\int_0^1 dx e^x$ für

$$\epsilon \in \{10^{-n} | n = 1, 2, \dots, 6\}.$$

Die Werte für die stückweise konstante, lineare oder quadratische Näherung sind in der folgenden Tabelle enthalten. Für das Simpsonverfahren konvergiert wie erwartet

die Näherung sehr schnell gegen den exakten Wert 1.7182818.

$n, \log M$	einfach	Trapez	Simpson	MC
1	1.633799	1.719713	1.718283	1.853195
2	1.709705	1.718296	1.718282	1.793378
3	1.717423	1.718282	1.718282	1.720990
4	1.718196	1.718282	1.718282	1.711849
5	1.718273	1.718282	1.718282	1.719329
6	1.718281	1.718282	1.718282	1.718257

3.1.2 Monte-Carlo Integration

Die Monte-Carlo Methode stammt wahrscheinlich von STANISLAW ULAM. Er fand die Methode 1946, als er sich Gedanken über die Gewinnwahrscheinlichkeiten beim Solitaire-Spiel machte. In seinen Worten:

The first thoughts and attempts I made to practice [the Monte Carlo Method] were suggested by a question which occurred to me in 1946 as I was convalescing from an illness and playing solitaires. The question was what are the chances that a Canfield solitaire laid out with 52 cards will come out successfully? After spending a lot of time trying to estimate them by pure combinatorial calculations, I wondered whether a more practical method than „abstract thinking“ might not be to lay it out say one hundred times and simply observe and count the number of successful plays. ...

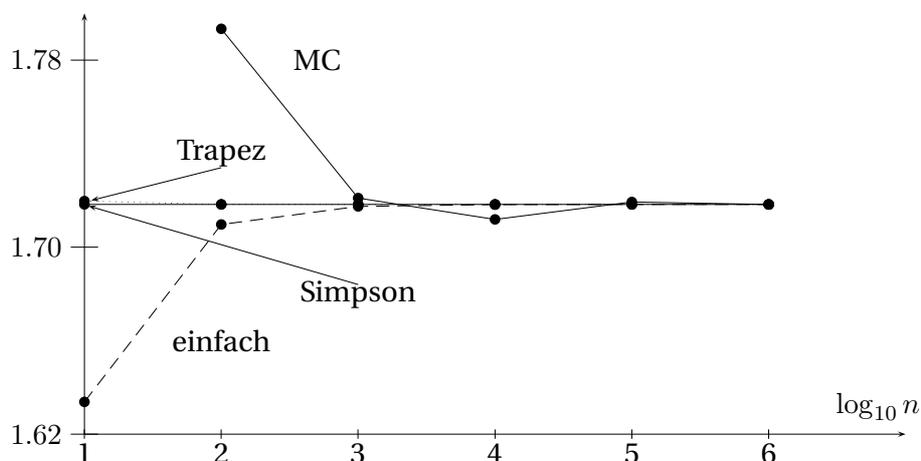
Einige Jahre später wurde die Methode auf das Neutronendifusionsproblem angewandt, das mit anderen Methoden nicht lösbar schien [25]. Eine wichtige Anwendung ist die Berechnung hochdimensionaler Integrale. Ein sehr einfacher Algorithmus wäre:

- erzeuge M gleichverteilte Punkte $\{x_1, \dots, x_M\}$ im Integrationsgebiet \mathcal{G} ,
- berechne für jeden Punkt den Funktionswert $f(x_i)$, $i = 1, \dots, M$,
- berechne den Mittelwert

$$I(M) = \frac{\text{Vol}(\mathcal{G})}{M} \sum_{i=1}^M f(x_i). \quad (3.19)$$

Für eine Riemann-integrierbare Funktion konvergiert $I(M)$ für große M gegen das Integral $\int_G f$. Die Werte in der letzten Spalte der obigen Tabelle enthalten $I(M = 10, 100, \dots)$ für das Integral der Exponentialfunktion.

Die folgende Abbildung illustriert das Konvergenzverhalten der drei Integrationsmethoden mit äquidistanten Stützstellen und der einfachen Monte-Carlo Integration. Für die Exponentialfunktion liefert die Methode von Simpson schon für zehn Intervalle das richtige Resultat e bis auf die 6. Stelle hinter dem Komma.



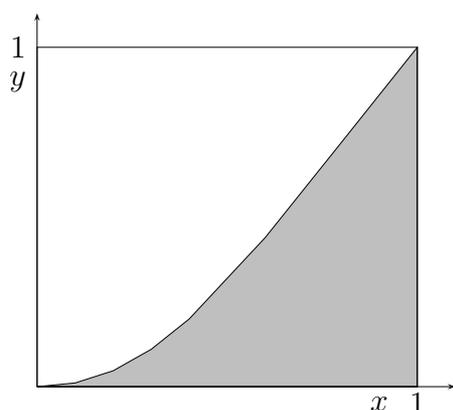
Unpraktikabel werden Standardverfahren wenn die Dimension n des Integrals

$$I = \int dq_1 \dots dq_n f(q_1, \dots, q_n) \equiv \int d^n q f(\mathbf{q}) \quad (3.20)$$

gross wird. Sind zum Beispiel die Integrationsgrenzen in jeder Dimension gleich 0 und 1, und wählt man in jeder Dimension den gleichen Abstand ϵ zwischen den Stützstellen, dann ist deren Anzahl ϵ^{-n} . Der Rechenaufwand ist proportional zur Anzahl Stützstellen. Nehmen wir als Beispiel $\epsilon = 0.1$, was sicherlich eine grobe Einteilung des Intervalls $[0, 1]$ ist, dann ist die Anzahl Stützstellen $\sim 10^n$. Die Auswertung einer Stützstelle auf einem PC dauert etwa 10^{-7} s und die Berechnung eines 12-fachen Integral etwa einen Tag.

Hit-or-miss Monte Carlo Methode und Binomialverteilung

Gesucht sei wieder der Wert des Integrals $I = \int dx f(x)$,



wobei wir ohne Beschränkung der Allgemeinheit annehmen dürfen, dass wir von 0 bis 1 integrieren. Mit einem Zufallszahlengenerator, der zwischen 0 und 1 gleichverteilte Zahlen liefert, werden zwei Zufallszahlen $0 \leq r_1, r_2 \leq 1$ erzeugt,

$$x = r_1 \quad , \quad y = r_2.$$

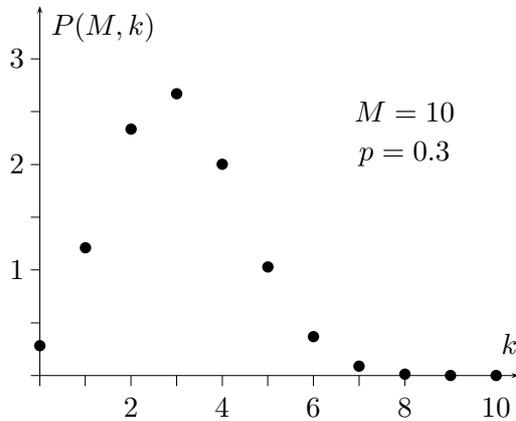
Wir haben getroffen, wenn $y \leq f(x)$ ist. Die Wahrscheinlichkeit für einen Treffer ist

$$p = \frac{\text{Anzahl Treffer}}{\text{Anzahl Versuche}} = \frac{\text{dunkle Fläche}}{\text{Gesamtfläche}} = \frac{I}{1} = I. \quad (3.21)$$

Bei M statistisch unabhängigen Versuchen können wir $k \in \{0, \dots, M\}$ Treffer landen und die Wahrscheinlichkeit dafür ist durch die *Binomialverteilung*

$$P(M, k) = \binom{M}{k} p^k (1-p)^{M-k} \quad \text{mit} \quad \sum_{k=0}^M P(M, k) = 1 \quad (3.22)$$

gegeben. Hier ist zum Beispiel $p^k (1-p)^{M-k}$ die Wahrscheinlichkeit dafür, dass die ersten k Versuche Treffer und die letzten $M-k$ Versuche Nieten ergeben. Der Binomialkoeffizient zählt die Anzahl Möglichkeiten, aus der Menge von M Versuchen k Treffer auszuwählen. Die Binomialverteilung beschreibt eine bei pM lokalisierte Glockenkurve und ist in der folgenden Figur für $M = 10$ und $p = 0.3$ geplottet.



Ihre erzeugende Funktion kann leicht berechnet werden,

$$Z(t) = \langle e^{tk} \rangle = \sum_{k=0}^M e^{kt} P(M, k) = (e^t p + (1 - p))^M. \quad (3.23)$$

Als Summe von Wahrscheinlichkeiten ist $Z(0) = 1$. Erwartungswerte von beliebigen Potenzen von k können durch ableiten der erzeugenden Funktion gewonnen werden.

Nicht unerwartet ist der *mittlere Anteil Treffer* gleich

$$\left\langle \frac{k}{M} \right\rangle = \frac{1}{M} \sum_{k=0}^M k P(M, k) = \frac{1}{M} \frac{dZ}{dt} \Big|_{t=0} = p. \quad (3.24)$$

Das Quadrat der Streuung um den Ursprung ist

$$\left\langle \frac{k^2}{M^2} \right\rangle = \frac{1}{M^2} \sum_{k=0}^M k^2 P(M, k) = \frac{1}{M^2} \frac{d^2 Z}{dt^2} \Big|_{t=0} = \frac{p}{M} + \left(1 - \frac{1}{M}\right) p^2 \quad (3.25)$$

und für das Quadrat der Streuung um die mittlere Anzahl Treffer findet man

$$\sigma^2 = \frac{1}{M^2} \langle (k - \langle k \rangle)^2 \rangle = \frac{1}{M^2} \frac{d^2 \log Z}{dt^2} \Big|_{t=0} = \frac{p(1-p)}{M}. \quad (3.26)$$

Die Streuung um den Mittelwert vermindert sich relativ langsam mit der Anzahl Versuche, $\sigma \sim M^{-1/2}$. Eine Schätzung von p ist h/M , wobei h die Anzahl Treffer bei M Versuchen ist. Die folgende Tabelle enthält die Schätzwerte p und σ für das Integral

$$I = \int_0^1 f(x), \quad f(x) = \frac{x^2 e^x}{1 - x + x e^x}. \quad (3.27)$$

für verschiedene Anzahl M von Versuchen. Die Streuung um den wahren Wert des Integrals, $I = 0.376370$, nimmt mit M ab. Die Werte in den ersten drei Spalten wurden mit dem Programm `hitmissflaeche.c` auf Seite 51 generiert.

Die grobe Hit-or-Miss Methode kann mit wenig Aufwand verbessert werden. Wenn nämlich p gegen 1 oder 0 strebt so wird σ sehr klein (allerdings wird für $p \rightarrow 0$ der re-

lative Fehler gross). Wir nehmen nun eine Hilfsfunktion $g(x)$, die $f(x)$ möglichst gut approximiert aber analytisch noch integriert werden kann. Ist das erste Integral in

$$I = \underbrace{\int (f(x) - g(x)) dx}_{p \text{ wird klein}} + \underbrace{\int g(x) dx}_{\text{bekannt}} \quad (3.28)$$

klein und der Integrand zwischen 0 und 1, dann können wir dieses Integral mit dem Hit-or-miss Verfahren mit verminderter Varianz berechnen. Für $f(x)$ in (3.27) wählen wir

$$g(x) = x^2 \quad \text{mit} \quad \int g(x) dx = 1/3.$$

Dann ergeben sich für das Integral die verbesserten Schätzwerte in der drittletzten Spalte und die Varianz in der letzten Spalte der Tabelle. Diese Werte wurden ebenfalls mit `hitmissflaeche.c` berechnet.

$\log_{10} M$	p	$I - p$	σ	p_{verb}	$I - p_{\text{verb}}$	σ_{verb}
1	0.500000	-0.123630	0.158114	0.333333	0.043037	0.000000
2	0.330000	0.046370	0.047021	0.363333	0.013037	0.017059
3	0.399000	-0.022630	0.015485	0.377333	-0.000963	0.006486
4	0.378900	-0.002530	0.004851	0.376833	-0.000463	0.002040
5	0.376570	-0.000200	0.001532	0.377693	-0.001323	0.000651
6	0.374857	0.001513	0.000484	0.376305	0.000065	0.000203
7	0.376273	0.000097	0.000153	0.376303	0.000067	0.000064

Summen von Zufallszahlen, Gaußverteilung und Grenzwertsatz

Das Programm `gaussdistr.c` auf Seite 52 erzeugt die Summe s von n auf dem Intervall $[0, 1]$ gleichverteilten unabhängigen Zufallszahlen x_1, \dots, x_n . Die erzeugende Funktion für die Summe ist

$$Z(t) = \langle e^{ts} \rangle = \int_{I^n} d^n x e^{t(x_1 + \dots + x_n)} = \left(\int_0^1 dx e^{tx} \right)^n = t^{-n} (e^t - 1)^n, \quad (3.29)$$

und für den Mittelwert von s finden wir

$$m = \langle s \rangle = \left. \frac{dZ}{dt} \right|_{t=0} = \int_{I^n} d^n x (x_1 + \dots + x_n) = \frac{n}{2}. \quad (3.30)$$

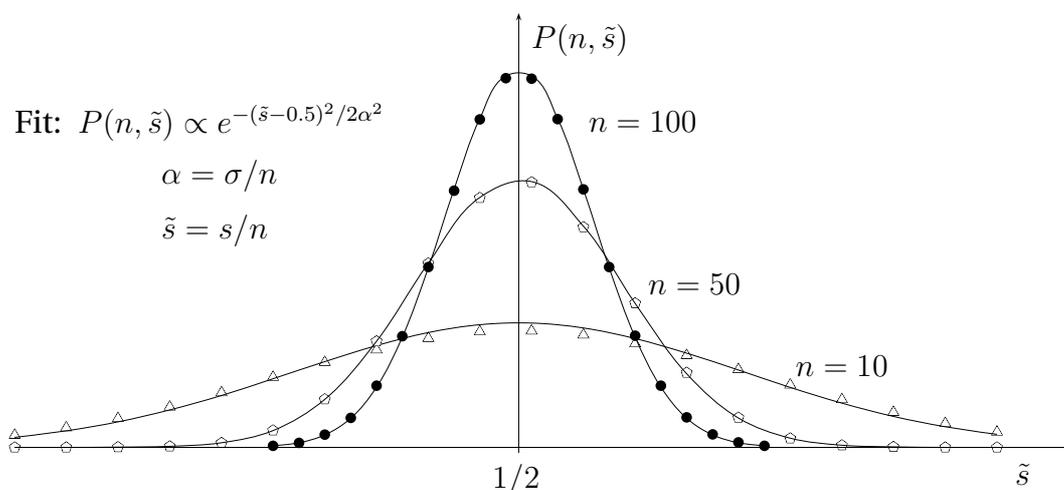
und für dessen Streuungsquadrat

$$\frac{d^2 \log Z}{dt^2} \Big|_{t=0} = \sigma^2 = \langle s^2 \rangle - m^2 = \frac{n}{12}. \tag{3.31}$$

Nach dem Gesetz der grossen Zahlen erwarten wir die Gaußverteilung

$$P_s = \frac{1}{\sqrt{2\pi} \sigma} e^{-(s-m)^2/2\sigma^2}. \tag{3.32}$$

Eine präzise Formulierung mit Beweis für das *Gesetz der grossen Zahlen* findet man auf Seite 49. Das Programm `gaussdistr.c` auf Seite 52 berechnet die Verteilung von s für die Summe von 10, 50 und 100 Zufallszahlen. Zur Bestimmung der Verteilung werden jeweils eine Million Versuche gemacht. Mit den zufälligen Werten für s wird ein Histogramm erstellt und im `array mean[100]` gespeichert. Wir haben die Zufallsvariable s mit n reskaliert, so dass das Maximum der Verteilung bei $1/2$ liegt. In der folgenden Abbildung werden die Resultate der MC-Simulation (Punkte, Dreiecke, Vierecke) mit den entsprechenden Gaußverteilungen verglichen.



Für gleichverteilte Zahlen in $[0, 1]$ ist der Mittelwert $1/2$ und die Varianz $1/12$. Die Ungleichung (3.56) für die Wahrscheinlichkeit dafür, dass s/n mehr als δ vom Mittelwert $1/2$ abweicht, nimmt folgende Form an

$$\Pr \left[\left| \frac{s}{n} - \frac{1}{2} \right| \geq \delta \right] \leq \frac{1}{12n\delta^2}. \tag{3.33}$$

3.2 Important Sampling

Numerische Integrationsverfahren nähern Integrale durch endliche Summen,

$$\int d^n q f(\mathbf{q}) \sim \sum_{\mu=1}^M f(\mathbf{q}_\mu) \Delta \mathbf{q}_\mu.$$

Für große n und schwach veränderliche Funktionen f kann es vorteilhaft sein, die Stützpunkte \mathbf{q}_μ zufällig zu wählen. In vielen Anwendungen variiert der Integrand allerdings um Größenordnungen für verschiedene Punkte und man vergeudet Rechenzeit wenn man Stützpunkte mit sehr kleinem Integranden auswählt. Beim *important sampling*, zum Beispiel dem Metropolis-Algorithmus, werden bevorzugt Punkte \mathbf{q}_μ mit großem Integranden berücksichtigt. Die Stützstellen liegen überwiegend da, wo der Integrand gross ist und dies verringert die Varianz der einzelnen Schätzung für das Integral.

Dazu nimmt man eine Funktion $g(\mathbf{q})$, deren Integral berechenbar ist und welche $f(\mathbf{q})$ möglichst gut annähert, und schreibt

$$\int_0^1 f(\mathbf{q}) d^n q = \int_0^1 \frac{f(\mathbf{q})}{g(\mathbf{q})} g(\mathbf{q}) d^n q. \quad (3.34)$$

Durch die Erzeugung von Zufallspunkten \mathbf{q}_μ die mit $g(\mathbf{q})d^n q$ verteilt sind, ergibt sich bei M „Messungen“ die Schätzung

$$\int f(\mathbf{q}) d^n q \approx \bar{f} = \frac{1}{M} \sum_{\mu=1}^M \frac{f(\mathbf{q}_\mu)}{g(\mathbf{q}_\mu)}, \quad (3.35)$$

und dabei variieren die Summanden jetzt nicht mehr so stark. Allerdings muß das Integral von g bekannt sein, um aus gleichverteilten Zufallszahlen solche zu erhalten, die mit g verteilt sind.

Bei der Berechnung von Erwartungswerten in Gitterfeldtheorien,

$$\langle O \rangle \approx \frac{1}{Z} \int \mathcal{D}\mathbf{q} O(\mathbf{q}) e^{-S(\mathbf{q})}, \quad \mathcal{D}\mathbf{q} = d^n q, \quad Z = \int e^{-S(\mathbf{q})} \mathcal{D}\mathbf{q}, \quad (3.36)$$

wäre es wünschenswert die Boltzmannverteilung

$$P(\mathbf{q}) = \frac{1}{Z} e^{-S(\mathbf{q})}, \quad (3.37)$$

als Vergleichsfunktion g zu wählen, weil dann nur noch über die im Vergleich zu P in

den meisten Fällen glatten Observablen $O(\mathbf{q})$ gemittelt werden müsste,

$$\langle O \rangle \approx \bar{O} = \frac{1}{M} \sum_{\mu=1}^M O(\mathbf{q}_\mu). \quad (3.38)$$

Hier ist M die Anzahl der erzeugten Punkte \mathbf{q}_μ . Damit wird die Monte Carlo-Schätzung \bar{O} für den Mittelwert von O zu einem arithmetischen Mittel. Passend verteilte $\{\mathbf{q}_1, \mathbf{q}_2, \dots\}$ sind aber nicht ohne Weiteres zu erzeugen.

Wir haben folgendes Problem: Die n -dimensionalen Integrale

$$\langle O \rangle = \int dq_1 \dots \int dq_n O(\mathbf{q})P(\mathbf{q}), \quad \int \mathcal{D}\mathbf{q} P(\mathbf{q}) = 1, \quad (3.39)$$

sollen für verschiedene Funktionen (Observablen) $O(\mathbf{q})$, aber die gleiche Wahrscheinlichkeitsdichte $P(\mathbf{q})$ berechnet werden. Dazu sollen Algorithmen gefunden werden, die nach P verteilte Punkte generieren. Der folgende Metropolis-Algorithmus [25] (er wird später begründet werden) erzeugt $\{\mathbf{q}_\mu\}$, die gemäß $P(\mathbf{q})$ verteilt sind:

1. Beginne mit $\mu = 0$ und einem beliebigen Startpunkt \mathbf{q}_μ im Integrationsbereich.
2. Wähle einen zweiten zufälligen Punkt \mathbf{q}' und ein Zufallszahl $r \in [0, 1]$.
3. Ist $P(\mathbf{q}')/P(\mathbf{q}_\mu) > r$ dann setze man $\mathbf{q}_{\mu+1} = \mathbf{q}'$, andernfalls $\mathbf{q}_{\mu+1} = \mathbf{q}_\mu$.
4. Erhöhe μ um eins und wiederhole die Schritte 2, 3 und 4.

Die so erzeugten Punkte \mathbf{q}_μ im Integrationsgebiet sind gemäß $P(\mathbf{q})$ verteilt, so dass

$$\bar{O} = \frac{1}{M} \sum_{\mu=1}^M O(\mathbf{q}_\mu) \quad (3.40)$$

ein Schätzwert für $\langle O \rangle$ ist, der für große M gegen $\langle O \rangle$ konvergiert. Jeder Punkt \mathbf{q}_μ der Markovkette heisst *Konfiguration*.

Das Programm `samplingflaeche.c` auf Seite 52 berechnet mit Hilfe des Metropolis-Algorithmus Schätzwerte für das eigentliche Integral

$$I = 128 \cdot \frac{\int_0^1 dx dy dz x^3 y^2 z \exp(-x^2 - y^2 - z^2)}{\int_0^1 dx dy dz \exp(-x^2 - y^2 - z^2)} = 128 \cdot \langle x^3 y^2 z \rangle \approx 2.4313142,$$

wobei für P die Exponentialfunktion gewählt wurde. Die Konvergenz zum exakten Resultat ist langsam, der Fehler ist von der Ordnung $1/\sqrt{M}$. Die folgende Tabelle enthält die berechneten Schätzwerte. Der letzte Eintrag ist das Resultat von $M = 10^6$

MC-Iterationen und hat einen Fehler von -0.00555 .

M	5 000	10 000	15 000	20 000	25 000	30 000	35 000
\bar{I}	2.33113	2.31536	2.33432	2.38934	2.3568	2.34805	2.35253
E	0.10018	0.11595	0.09699	0.04197	0.07449	0.08327	0.07878
M	40 000	45 000	50 000	55 000	60 000	65 000	70 000
\bar{I}	2.34528	2.34193	2.35193	2.35089	2.35659	2.35952	2.36130
E	0.08603	0.08939	0.07938	0.08043	0.07473	0.07179	0.07001
M	75 000	80 000	85 000	90 000	95 000	100 000	1 000 000
\bar{I}	2.36969	2.37196	2.36937	2.38248	2.38742	2.38448	2.43686
E	0.06162	0.05935	0.06194	0.04884	0.04390	0.04683	-0.00555

3.3 Elemente der Wahrscheinlichkeitstheorie

In den bisher angestellten und auch kommenden Untersuchungen spielen Begriffe und Ergebnisse der Wahrscheinlichkeitstheorie eine nicht unerhebliche Rolle. Es lohnt sich deshalb die für uns wesentlichen Begriffe dieser Theorie zusammenzutragen. Die axiomatische Begründung der Theorie wurde in den 1930er Jahren von KOLMOGOROW entwickelt. Sie handelt von Ereignissen die als Mengen aufgefasst werden und denen Wahrscheinlichkeiten zugeordnet sind. Wahrscheinlichkeiten sind reelle Zahlen zwischen 0 und 1. Die Zuordnung von Wahrscheinlichkeiten zu Ereignissen genügt gewissen Anforderungen.

Wir denken uns einen Vorgang, ein Ereignis oder ein Experiment mit zufälligem Ergebnis. Ω sei die Menge der Elementarereignisse. Ein allgemeines Ereignis ist eine Teilmenge von Ω und entsprechend ist der Ereignisraum Σ eine Menge von Teilmengen von Ω . Ein Maß $Pr : \Sigma \rightarrow [0, 1]$ im Sinne der Maßtheorie heisst Wahrscheinlichkeitsmaß wenn $Pr(\Omega) = 1$ gilt. Das Tripel (Ω, Σ, Pr) wird als Wahrscheinlichkeitsraum bezeichnet.

Ein Wahrscheinlichkeitsmaß sollte folgende Axiome erfüllen:

- Für jedes Ereignis $A \subset \Omega$ ist die Wahrscheinlichkeit $Pr(A) \in [0, 1]$.
- Das sichere Ereignis hat die Wahrscheinlichkeit 1, $Pr(\Omega) = 1$.
- Die Wahrscheinlichkeit einer Vereinigung abzählbar vieler disjuncter Ereignisse ist die Summe der Wahrscheinlichkeiten der Einzelereignisse (σ -Additivität)

$$Pr(A_1 \cup A_2 \cup \dots) = \sum Pr(A_i) \quad \text{falls} \quad A_i \cap A_j = \emptyset.$$

Aus diesen Kolmogorowschen Axiomen folgen zum Beispiel die Eigenschaften

$$Pr(\Omega \setminus A) = 1 - Pr(A) \quad \text{und} \quad Pr(A_1 \cup A_2) = Pr(A_1) + Pr(A_2) - Pr(A_1 \cap A_2).$$

Das zufällige Ergebnis $X : \Omega \rightarrow \mathbb{R}$ heisst *Zufallsvariable* mit Erwartungswert (Mittelwert)

$$\langle X \rangle = \sum_{w \in \Omega} X(w) \cdot Pr[w] = \sum_{x \in X(\Omega)} x \cdot \sum_{\substack{w \in \Omega \\ X(w)=x}} Pr[w] = \sum_{x \in X(\Omega)} x \cdot P_X(x), \quad (3.41)$$

wobei $Pr[w]$ die Wahrscheinlichkeit für das Ereignis w ist und

$$P_X(x) = Pr(X^{-1}(x)) \quad (3.42)$$

die Wahrscheinlichkeit dafür angibt, dass X den Wert x annimmt. Der mittlere Wert bei einer wiederholten Messung von X ist gerade $\langle X \rangle$. Die Wahrscheinlichkeit dafür, ein Ergebnis im Intervall Δ zu finden ist

$$P_X(\Delta) = \sum_{x \in \Delta} P_X(x). \quad (3.43)$$

Ist X eine stetige reellwertige Zufallsvariable, dann wird P_X zu einer Wahrscheinlichkeitsdichte und

$$P_X(\Delta) = \int_{\Delta} P_X(x) dx. \quad (3.44)$$

Für eine stetige Funktion f ist der Erwartungswert der Zufallsvariablen $f(X)$ gleich

$$\langle f(X) \rangle = \sum_{w \in \Omega} f(X(w)) \cdot Pr[w] = \sum_{x \in X(\Omega)} f(x) \cdot P_X(x). \quad (3.45)$$

Für beliebige Zufallsvariablen X_1, \dots, X_N ist der Erwartungswert linear,

$$\langle X \rangle = \langle X_1 \rangle + \dots + \langle X_N \rangle. \quad (3.46)$$

Sie heissen *unabhängig*, wenn die Wahrscheinlichkeit für die Ereignisse w mit $X_i(w) = x_i$ für beliebige Ergebnisse x_1, \dots, x_N faktorisiert,

$$Pr(\{w | X_1(w) = x_1, \dots, X_N(w) = x_N\}) = P_{X_1}(x_1) \cdots P_{X_N}(x_N). \quad (3.47)$$

Nach dieser Definition kann X nur unabhängig von X sein, wenn $P_X(x) \in \{0, 1\}$ für

alle x gilt. Die erzeugende Funktion von unabhängigen Zufallsvariablen faktorisiert,

$$\begin{aligned} \langle e^{i(t_1 X_1 + \dots + t_N X_N)} \rangle &= \sum_w e^{i(t_1 x_1 + \dots + t_N x_N)} Pr(\{w | X_1(w) = x_1, \dots, X_N(w) = x_N\}) \\ &= \sum_{x_1, \dots, x_N} \prod_{k=1}^N e^{it_k x_k} P_{X_k}(x_k) = \langle e^{it_1 X_1} \rangle \dots \langle e^{it_N X_N} \rangle. \end{aligned} \quad (3.48)$$

Daraus folgt für $t = t_1 = \dots = t_N$ eine nützliche Gleichung für die erzeugende Funktion der verbundenen Korrelationen unabhängiger Zufallsvariablen,

$$\log \langle e^{itX} \rangle = \sum_{i=1}^N \log \langle e^{itX_i} \rangle, \quad X = X_1 + \dots + X_N. \quad (3.49)$$

Leiten wir zweimal nach t ab und setzen danach $t = 0$, so ergibt sich

$$\text{Var}[X] = \sum_{i=1}^N \text{Var}[X_i], \quad \text{Var}[X] \equiv \langle (\Delta X)^2 \rangle = \langle X^2 \rangle - \langle X \rangle^2, \quad (3.50)$$

wobei ΔX die Zufallsvariable $X - \langle X \rangle$ bezeichnet. Die Varianz der Summe von unabhängigen Zufallsvariablen X_i ist gleich der Summe der Varianzen der X_i .

Satz [Markov] Sei X eine Zufallsvariable, die nur nicht-negative Werte annimmt. Dann gilt für alle $t \in \mathbb{R}^+$

$$P[X \geq t] \leq \frac{1}{t} \langle X \rangle. \quad (3.51)$$

Der Beweis ist nicht sehr schwierig,

$$\begin{aligned} \langle X \rangle &= \sum_{x \geq 0} x \cdot P_X(x) \geq \sum_{x \geq t} x \cdot P_X(x) \geq \sum_{x \geq t} t \cdot P_X(x) \\ &= t \sum_{x \geq t} P_X(x) = t \cdot P[X \geq t]. \end{aligned}$$

Aus der Markovschen Ungleichung ergibt sich die nützliche Chebyshevsche Schranke für die mittlere Abweichung einer reellwertigen Zufallsvariablen von ihrem Mittelwert,

Satz [Chebyshev] Sei X eine Zufallsvariable und $t \in \mathbb{R}^+$. Dann gilt

$$P[|\Delta X| \geq t] \leq \frac{1}{t^2} \text{Var}[X]. \quad (3.52)$$

Der Beweis dieser Ungleichung ist ein Einzeiler,

$$P[|\Delta X| \geq t] = P[(\Delta X)^2 \geq t^2] \stackrel{(3.51)}{\leq} \frac{\text{Var}[X]}{t^2}.$$

Ein sehr wichtiges Theorem ist das

Satz [Gesetz der großen Zahlen] Gegeben sei eine Zufallsvariable X . Ferner seien $\epsilon, \delta > 0$ beliebig aber fest. Setzt man

$$K := \frac{\text{Var}[X]}{\epsilon \cdot \delta^2} = \text{const}, \quad (3.53)$$

dann gilt für alle $N \geq K$: Sind X_1, \dots, X_N unabhängige Zufallsvariablen mit derselben Verteilung wie X und setzt man $Z = (X_1 + \dots + X_N)/N$. Dann gilt

$$P[|\Delta Z| \geq \delta] \leq \epsilon. \quad (3.54)$$

Beweis: Offensichtlich ist

$$\langle Z \rangle = \frac{1}{N} \sum \langle X_i \rangle = \langle X \rangle \quad \text{und} \quad \text{Var}[Z] = \frac{1}{N^2} \sum \text{Var}[X_i] = \frac{\text{Var}[X]}{N}.$$

Die letzte Ungleichung ist für sich interessant. Es ist das berühmte Quadratwurzelgesetz für die *relativen* Schwankungen,

$$\frac{\sqrt{\text{Var}[Z]}}{\langle Z \rangle} \leq \frac{1}{N} \frac{\sqrt{\text{Var}[X]}}{\langle X \rangle}. \quad (3.55)$$

Die Größenordnung der relativen Schwankungen von Z ist somit von $O(N^{-1/2})$. Bei einer großen Menge von X_i (Systemen) dürfen wir infolgedessen die Schwankungen vernachlässigen. Mit der Chebyshev-Ungleichung erhalten wir mit Hilfe der vorletzten Gleichung

$$P[|\Delta Z| \geq \delta] \leq \frac{\text{Var}[Z]}{\delta^2} = \frac{\text{Var}[X]}{N \cdot \delta^2} \leq \epsilon. \quad (3.56)$$

Sei nun X_i eine Folge unabhängiger, gleichverteilter Zufallsvariablen mit verschwindenden Mittelwerten und Kovarianzmatrix $\langle X_i X_j \rangle = \delta_{ij} \sigma^2$, und sei

$$Y_N = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{i=1}^N X_i. \quad (3.57)$$

Die Erzeugende Funktion für Y_N berechnet sich zu

$$\begin{aligned}\langle e^{itY_N} \rangle &= \prod_{i=1}^N \left\langle \exp \left(i \frac{t}{\sqrt{N}} X_i \right) \right\rangle \\ &= \left\langle 1 + i \frac{t}{\sqrt{N}} X_1 - \frac{1}{2} \frac{t^2}{N} X_1^2 + \frac{1}{O(N^{3/2})} \right\rangle^N \xrightarrow{N \rightarrow \infty} \exp \left(-\frac{1}{2} t^2 \sigma^2 \right).\end{aligned}$$

Andererseits ist die erzeugende Funktion einer Gaußschen Zufallsvariable mit Mittel m und Varianz (Streuungsquadrat) σ^2

$$\frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma} \int dx e^{-(x-m)^2/2\sigma^2} e^{itx} = \exp \left(imt - \frac{1}{2} t^2 \sigma^2 \right).$$

Ein Vergleich zeigt, dass für grosse N die Zufallsvariablen Y_N Gaußverteilt sind mit Mittel 0 und Varianz σ^2 .

3.4 Programme für Kapitel 3

Hier finden sie die im Kapitel über „Hochdimensionale Integrale“ benutzten Programme `1dintegral.c`, `hitmissflaeche.c`, `gaussdistr.c` und `samplingflaeche.c`

1dintegral.c: Dieses Programm berechnet das Integral $\int \exp(x)$ von 0 bis 1 für

$$\epsilon \in \{10^{-n} | n = 1, 2, \dots, 6\}.$$

mit dem Rechteck-, Trapez- und Simpsonverfahren sowie mit Hilfe der Monte-Carlo-Methode.

```
/* Programm 1dintegral.c
/* numerische Integration von f(x) von \alpha bis beta
/* mit vier verschiedenen Verfahren */
#include <stdio.h> #include <stdlib.h> #include <math.h>
/* Hier die zu integrierende Funktion eingeben */
double f(double x)
{return exp(x);}
/* Zufallszahl zwischen 0 und 1 */
double randa(void)
{return (double)rand() / ((double)RAND_MAX);}
int main(void)
{
    double epsi, Sum, I1, I2, I3, I4, x0, x1, x2; /* Integrationsgrenzen */
    double alpha=0, beta=1;
    long N, i, M=0;
    for (N=10; N<1000001; N*=10)
```

```

{
  M=M+1;epsi=(beta-alpha)/N;Sum=0;
/* einfache Methode */
  for (i=0;i<N;i++)
    {x0=alpha+epsi*i;Sum=Sum+f(x0);}
  I1=Sum*epsi;
/* Trapezregel */
  Sum=0;
  for (i=0;i<N;i++)
    {x0=alpha+epsi*i;x1=x0+epsi;Sum=Sum+(f(x0)+f(x1))/2.0;}
  I2=Sum*epsi;
/* Simpson-Methode */
  Sum=0;
  for (i=0;i<N-1;i=i+2)
    {x0=alpha+epsi*i;x1=x0+epsi;x2=x1+epsi;
    Sum=Sum+(f(x0)+4.0*f(x1)+f(x2))/3.0;}
  I3=Sum*epsi;
/* Monte-Carlo-Methode */
  Sum=0;
  for (i=0;i<N;i++)
    {x0=randa();Sum=Sum+f(x0);}
  I4=epsi*Sum;
  printf("%1.6f,%1.6f,%1.6f,%1.6f\n",M,I1,I2,I3,I4);
}
return 0; }

```

hitmissflaeche.c: Das Programm berechnet die Fläche unter einer Funktion mit Hilfe der „Hit-or-Miss“ Monte-Carlo Methode. Naiv und mit Verbesserung.

```

/* Programm hitmissflaeche.c
/* Integration von f(x)
/* mit hit-or-miss-Verfahren */
#include <stdio.h>
#include <stdlib.h>
#include <math.h>
#include <time.h>
#define M 1000001 /* Anzahl Versuche */
/* Hier die zu integrierende Funktion eingeben */
double f(double x)
{return x*x*exp(x)/(1-x+x*exp(x));}
/* Funktion fuer verbessertes Verfahren */
double g(double x)
{return x*x*exp(x)/(1-x+x*exp(x))-x*x;}
int main(void)
{double sum1,sum2,I1,I2,sig1,sig2,x,y;
  long n,m;
  srand48(time(NULL));
  for (m=10;m<M;m*=10)
    {sum1=0;sum2=0;
     for (n=1;n<m+1;n++)
       {x=drand48();y=drand48();
        if (y<f(x)) sum1=sum1+1;
        if (y<g(x)) sum2=sum2+1;
       };
     I1=sum1/m;I2=sum2/m;
     sig1=sqrt(I1*(1-I1)/m);sig2=sqrt(I2*(1-I2)/m);

```

```

    n=(int)log10(m);
    /* Ausgabe in TeX-array-Format */
    printf("%i&%.6f&%.6f&%.6f&%.6f&%.6f\\ \\ \\ \\ \n",
        n,I1,0.376370-I1,sig1,1/3.0+I2,0.043037-I2,sig2);
};
return 0;
}

```

gaussdistr.c: Das Programm berechnet die Verteilung der Summe von 10, 50 und 100 Zufallszahlen. Zur Bestimmung der Verteilung werden jeweils 1 Million Versuche gemacht. Aus den zufälligen Werten für s wird ein Histogramm erstellt und im array `mean[100]` gespeichert. Wir haben die Zufallsvariable s mit $2m$ reskaliert, so dass das Maximum der Verteilung bei $1/2$ liegt.

```

/* Programm gaussdistr.c
/* Summe von M Zufallszahlen
/* im Intervall [0,1] */
#include <stdio.h>
#include <stdlib.h>
#include <math.h>
#include <time.h>
#define PI 3.1415926
#define ANZ 10 /* Wieviele Zufallszahlen addiert werden */
#define M 1000000 /* Anzahl MG-Iterationen */
int main(void)
{ double sum,mean[100];
  double dM=100.0/(double)M; /* Skalierungsfaktor 100 */
  int i,j,sumi;
  /* Initialisierung */
  for (i=0;i<100;i++)
    mean[i]=0;sum=0;rand48(time(NULL));
  /* M-fache Wiederholung des Experiments */
  for (i=0;i<M;i++)
    {sum=0;
     /* Summe von ANZ Zufallszahlen in jedem Experiment */
     for (j=0;j<ANZ;j++)
       sum=sum+drand48();
     /* 100 Bins fuer Histogramm */
     sumi=(int)(100.0*sum/ANZ);
     ++mean[sumi];
    };
  for (i=30;i<70;i=i+2)
    printf("(%i,%.2f)",i,mean[i]*dM);
  puts("_");
  for (i=30;i<70;i=i+2)
    {sum=i-49.5;
     printf("(%i,%.2f)",i,sqrt(6*ANZ/PI)*exp(-6*ANZ*sum*sum*dM));
    };
  puts("_");
  return 0;
}

```

samplingflaeche.c: Beim *important sampling* zur Berechnung von Integralen werden bevorzugt Punkte mit großem Integranden berücksichtigt und dies verringert die Varianz der einzelnen Schätzung. Das Programm `samplingflaeche.c` berechnet mit Hilfe des Metropolis-Algorithmus das eigentliche Integral

$$128 \cdot \frac{\int_0^1 dx dy dz x^3 y^2 z \exp(-x^2 - y^2 - z^2)}{\int_0^1 dx dy dz \exp(-x^2 - y^2 - z^2)} \approx 2.4313142.$$

```

/* Programm samplingflaeche.c
/* Berechnet 3-d Integral mit important sampling.
#include <stdio.h>
#include <stdlib.h>
#include <math.h>
#include <time.h>
#define M 100000 /* Anzahl gemessener MC-Iterationen */
#define MA 1000 /* jede MA'te Konfiguration gemessen */
/* Verteilung */
double P(double *x)
{ return exp(-x[0]*x[0]-x[1]*x[1]-x[2]*x[2]); }
/* Funktion */
double f(double *x)
{ return 128.0*x[0]*x[0]*x[0]*x[1]*x[1]*x[2]; }
int main(void)
{ double I, Sum, x[3], y[3];
  long i, j;
  srand48(time(NULL));
  Sum=0; x[0]=drand48(); x[1]=drand48(); x[2]=drand48();
  for (i=1; i<M+1; i++)
    { for (j=0; j<MA; j++)
      { y[0]=drand48(); y[1]=drand48(); y[2]=drand48();
        if (P(y)>P(x)*drand48())
          { x[0]=y[0]; x[1]=y[1]; x[2]=y[2]; }
      }
    Sum=Sum+f(x); I=Sum/i;
    if (i%5000==0)
      printf(" i=%ld, I=%%.5f Fehler=%%.5f\n", i, I, 2.4313142-I);
  };
  return 0;
}

```

3.5 Aufgaben

Aufgabe 7: Numerische Berechnung von Integralen

Berechnen Sie mit Hilfe der Simpson-Regel das Integral

$$\int_0^1 dx e^x$$

und vergleichen Sie mit dem exakten Resultat.

Kapitel 4

Simulationen

In diesem Kapitel sollen Simulationsverfahren erläutert werden, die für die Untersuchungen in Spin- und Quantensystemen verwendet wurden und werden. Wir wenden sie auf einfache quantenmechanische Systeme, zum Beispiel den anharmonischen Oszillator, an. In späteren Kapiteln finden sich Anwendungen der hier besprochenen Methoden zur Untersuchung von nichtstörungstheoretischen Eigenschaften von Spinsystemen und quantenfeldtheoretischen Modellen. Wir beginnen mit der Besprechung von Markovprozessen, da alle Simulation derartige Prozesse realisieren.

4.1 Markovprozesse

Wir diskutieren nun eine Realisierung der in Kapitel 3 bereits besprochenen Methode des „important sampling“. Dazu betrachten wir ein System mit f Freiheitsgraden. Wir bezeichnen die Zustände mit $s \in 1, 2, \dots, f$. Die nach P -verteilten Konfigurationen werden nun mit Hilfe eines geeigneten Markovprozesses erzeugt. Bei einem derartigen Prozess hängt die Übergangswahrscheinlichkeit $W(s, s') = W(s \rightarrow s')$ in den Zustand s' nur vom unmittelbar „früheren“ Zustand s ab. Das System hat ein Kurzzeitgedächtnis und erinnert sich nicht daran, was früher geschah. Da $W(s, s')$ eine Übergangswahrscheinlichkeit ist, muss die *stochastische Matrix* W positiv und normiert sein,

$$W(s, s') \geq 0 \quad \text{und} \quad \sum_{s'} W(s, s') = 1. \quad (4.1)$$

Bei einem Zweistufenprozess von s nach s' durchläuft das System irgend einen Zwischenzustand s_1 . Deshalb ist die Wahrscheinlichkeit für den Übergang $s \rightarrow s'$ in zwei

Schritten

$$W^{(2)}(s, s') = \sum_{s_1} W(s, s_1)W(s_1, s'). \quad (4.2)$$

Ähnlich gilt für einen n -Stufen-Prozess

$$W^{(n)}(s, s') = \sum_{s_1 \cdots s_{n-1}} W(s, s_1)W(s_1, s_2) \cdots W(s_{n-1}, s') = (W^n)(s, s'). \quad (4.3)$$

Das Langzeitverhalten des System wird von W^n mit $n \rightarrow \infty$ bestimmt. Man versucht nun einen Markovprozess zu konstruieren, für den die Konfigurationen für grosse „Zeiten“ n nach der Boltzmannverteilung (3.37) verteilt sind.

Stochastische Matrizen transformieren *stochastische Vektoren*, also Vektoren p mit nicht-negativen Elementen p_s die zu Eins addieren, $\sum p_s = 1$, in stochastische Vektoren,

$$\sum_{s'} (pW)(s') = \sum_{ss'} p_s W(s, s') = \sum_s p_s = 1.$$

Das Element p_s des stochastischen Vektors ist die Wahrscheinlichkeit dafür, das System im Zustand s zu finden. Zum Beispiel konvergieren die Potenzen der stochastischen Matrix

$$W = \begin{pmatrix} a & 1-a \\ 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad (4.4)$$

mit Eigenwerten 1 und $a < 1$ exponentiell schnell gegen eine stochastische Matrix,

$$W^n = \begin{pmatrix} a^n & 1-a^n \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \xrightarrow{n \rightarrow \infty} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$$

Später werden wir zeigen, dass unter gewissen Bedingungen an W die W^n gegen eine stochastische Matrix mit *identischen Zeilen* konvergiert. Ein zweites einfaches Beispiel ist

$$W = \begin{pmatrix} a & \frac{1}{2}(1-a) & \frac{1}{2}(1-a) \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix} \quad \text{mit } a \leq 1. \quad (4.5)$$

Die geraden Potenzen von W sind

$$W^n = \begin{pmatrix} a^n & \frac{1}{2}(1-a^n) & \frac{1}{2}(1-a^n) \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \longrightarrow \begin{pmatrix} 0 & \frac{1}{2} & \frac{1}{2} \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad n \text{ gerade}$$

und die ungeraden Potenzen

$$W^n = \begin{pmatrix} a^n & \frac{1}{2}(1-a^n) & \frac{1}{2}(1-a^n) \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix} \longrightarrow \begin{pmatrix} 0 & \frac{1}{2} & \frac{1}{2} \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad n \text{ ungerade.}$$

Für $a < 1$ wird ein stochastischer Vektor \mathbf{p} in

$$\begin{aligned} \mathbf{p}W^{2n} &\xrightarrow{n \rightarrow \infty} \left(0, p_2 + \frac{p_1}{2}, p_3 + \frac{p_1}{2}\right) \\ \mathbf{p}W^{2n+1} &\xrightarrow{n \rightarrow \infty} \left(0, p_3 + \frac{p_1}{2}, p_2 + \frac{p_1}{2}\right) \end{aligned}$$

abgebildet. Die Folge $\mathbf{p}W^n$ nähert sich exponentiell schnell einer periodischen Bahn mit der Periode 2. Wir werden weiter unten zeigen, dass die Folge deshalb nicht konvergiert weil jede Spalte von W mindestens eine Null enthält.

Jede stochastische Matrix hat den Eigenwert 1. Der entsprechende Rechtseigenvektor ist $\sim (1, 1, \dots, 1)^T$. Zur Bestimmung des Linkseigenvektors betrachten wir die Folge

$$\mathbf{p}_n = \frac{1}{n} \sum_{j=0}^{n-1} \mathbf{p} W^j. \quad (4.6)$$

Stochastische Vektoren bilden eine kompakte Menge und deshalb hat die Folge (4.6) eine konvergente Teilfolge,

$$\frac{1}{n_k} \sum_0^{n_k-1} \mathbf{p} W^j \longrightarrow \mathbf{P}.$$

Wir multiplizieren von rechts mit W und finden

$$\frac{1}{n_k} \sum_1^{n_k} \mathbf{p} W^j \longrightarrow \mathbf{P}W.$$

Lassen wir nun in der Differenz der beiden letzten Formeln, also in

$$\frac{1}{n_k} (\mathbf{p} - \mathbf{p} W^{n_k}) \longrightarrow \mathbf{P} - \mathbf{P}W$$

n_k gegen ∞ streben, dann folgt

$$\mathbf{P}W = \mathbf{P}. \quad (4.7)$$

Damit hat jede stochastische Matrix W mindestens einen *Fixpunkt* \mathbf{P} , d.h. einen Linkseigenvektor mit Eigenwert 1.

Wir nehmen nun an, W habe mindestens eine Spalte, deren minimales Element größer gleich einer positiven Zahl δ ist. Dann können *alle* Zustände mit nicht-verschwindender Wahrscheinlichkeit in einen bestimmten Zustand übergehen. Matrizen mit dieser Eigenschaft heißen *attraktiv*. M in (4.4) ist attraktiv während dasjenige in (4.5) nicht attraktiv ist. Wir notieren noch, dass für zwei reelle Zahlen p und p' gilt

$$|p - p'| = p + p' - 2 \min(p, p'),$$

so dass für zwei stochastische Vektoren

$$\|\mathbf{p} - \mathbf{p}'\| = 2 - 2 \sum_s \min(p_s, p'_s). \quad (4.8)$$

Nun beweisen wir, dass ein attraktives W auf Vektoren $\Delta = (\Delta_1, \dots, \Delta_f)$ mit

$$\|\Delta\| \equiv \sum |\Delta_s| = 2 \quad \text{und} \quad \sum \Delta_s = 0 \quad (4.9)$$

kontraktiv ist. Zuerst beweisen wir diese Eigenschaft für die Differenz zweier kartesischer Basisvektoren e_s , $s = 1, \dots, f$ (alle Einträge bis auf den s 'ten verschwinden). Dazu wenden wir die Identität (4.8) auf die stochastischen Vektoren $e_s W$ und $e_{s'} W$ an, also auf Zeilen von W mit den Nummern s und s' . Für ein attraktives W finden wir für $s \neq s'$

$$\begin{aligned} \|e_s W - e_{s'} W\| &= 2 - 2 \sum_{s''} \min \{W(s, s''), W(s', s'')\} \\ &\leq 2 - 2\delta = (1 - \delta) \underbrace{\|e_s - e_{s'}\|}_{=2} \quad \text{mit} \quad 0 < \delta < 1, \end{aligned} \quad (4.10)$$

was beweist, dass W auf den Differenzvektoren $e_s - e_{s'}$ kontraktiv ist. Wir haben

$$\min_{s''} \{W(s, s'') W(s', s'')\} \geq \min \{W(s, s^*) (W(s', s^*))\} \geq \delta$$

benutzt, wobei s^* zur Spalte mit Elementen größer oder gleich δ gehört.

Nun beweisen wir diese Eigenschaft für alle Vektoren Δ in (4.9). Wegen

$$\begin{aligned} \sum_{s:\Delta_s \geq 0} \Delta_s - \sum_{s:\Delta_s < 0} \Delta_s &= \|\Delta\| = 2 \\ \sum_{s:\Delta_s \geq 0} \Delta_s + \sum_{s:\Delta_s < 0} \Delta_s &= 0 \end{aligned}$$

folgt unmittelbar

$$\sum_{\Delta_s \geq 0} \Delta_s = 1 \quad \text{und} \quad \sum_{\Delta_s < 0} \Delta_s = -1. \quad (4.11)$$

Um die Notation einfach zu halten bezeichnen wir in den folgenden Formeln die nicht-negativen Elemente von Δ mit Δ_s und die negativen Elemente mit $\Delta_{s'}$. Man beachte, dass die Indexmengen $\{s\}$ und $\{s'\}$ eine leere Schnittmenge haben. Wegen (4.11) gilt

$$\|\Delta\| = 2 = -2 \sum \Delta_s \sum \Delta_{s'} = - \sum \Delta_s \Delta_{s'} \underbrace{\|e_s - e_{s'}\|}_{=2}, \quad (4.12)$$

wobei $s \neq s'$ angenommen wurde. Um die Norm von ΔW abzuschätzen benutzen wir

$$\sum \Delta_s e_s = - \sum \Delta_{s'} \sum \Delta_s e_s, \quad \sum \Delta_{s'} e_{s'} = + \sum \Delta_s \sum \Delta_{s'} e_{s'},$$

wobei wir von (4.11) Gebrauch machten, und dies führt auf die Ungleichung

$$\begin{aligned} \|\Delta W\| &= \left\| \sum \Delta_s e_s W + \sum \Delta_{s'} e_{s'} W \right\| = \left\| - \sum \Delta_{s'} \Delta_s (e_s - e_{s'}) W \right\| \\ &\leq - \sum \Delta_s \Delta_{s'} \|(e_s - e_{s'}) W\| \leq - \sum \Delta_s \Delta_{s'} \|e_s - e_{s'}\| (1 - \delta), \end{aligned} \quad (4.13)$$

wobei wir die Abschätzung (4.10) benutzten. Der Vergleich mit (4.12) führt dann auf die gesuchte Ungleichung,

$$\|\Delta W\| \leq (1 - \delta) \|\Delta\| \quad (4.14)$$

die besagt, dass W auf den Vektoren (4.9) kontraktiv ist. Da die Ungleichung linear in Δ ist, können wir die Bedingung $\|\Delta\| = 2$ aufgeben. Damit ist W kontraktiv auf allen Vektoren deren Elemente zu Null addieren und insbesondere auf Differenzen von zwei stochastischen Vektoren.

Iterieren wir die Ungleichung, so erhalten wir

$$\|\Delta W^n\| \leq (1 - \delta)^n \|\Delta\|. \quad (4.15)$$

Nun wenden wir diese Abschätzung auf $p - P$ an, wobei P den Fixpunkt in (4.7) bezeichnet und p ein beliebiger stochastischer Vektor ist. Da die Elemente von $p - P$ zu Null addieren, gilt offensichtlich (4.15) und wir folgern

$$\|(p - P)W^n\| = \|pW^n - P\| \xrightarrow{n \rightarrow \infty} 0$$

oder, dass

$$pW^n \xrightarrow{n \rightarrow \infty} P. \quad (4.16)$$

Für die stochastischen Vektoren e_s ist die linke Seite die s 'te Zeile von $\lim W^n = W^{\text{eq}}$ und deshalb hat W^{eq} identische Zeilen. Also sind alle Elemente in einer Spalte von W^{eq} gleich, wie im obigen ersten Beispiel,

$$W^{\text{eq}}(s, s') = \lim_{n \rightarrow \infty} W^n(s, s') = P_{s'}, \quad (4.17)$$

wobei $P_{s'}$ das Element s' von P bezeichnet. Nun folgt, dass die Gleichgewichtsgrößen P und W^{eq} *eindeutig* sind: Es sei P' ein zweiter Fixpunkt des Markovprozesses. Dann ist

$$P'_{s'} = \sum_s P'_s W(s, s') = \lim_{n \rightarrow \infty} \sum_s P'_s W^n(s, s') = \sum_s P'_s P_{s'} = P_{s'},$$

und dies beweist, dass P der eindeutige Fixpunkt ist.

Es sollte klar sein, wie man auf Systeme mit kontinuierlichen Freiheitsgraden, zum Beispiel ein mechanisches System, dessen reine Zustände durch Punkte $q \in \mathbb{R}^n$ gegeben sind, verallgemeinert: Anstelle der Elemente p_s von stochastischen Vektoren führt man *Wahrscheinlichkeitsdichten* $p(q)$ ein. Summen über den diskreten Index s werden zu Integralen über die kontinuierliche Variable q . Für derartige System haben die Bedingungen (4.1) die Form

$$W(q, q') \geq 0 \quad \text{und} \quad \int \mathcal{D}q' W(q, q') = 1. \quad (4.18)$$

Bezeichnet $P(q)$ die Gleichgewichtsverteilung, so lautet die Bedingung (4.7)

$$P(q') = \int \mathcal{D}q P(q) W(q, q'). \quad (4.19)$$

4.2 Detailliertes Gleichgewicht

In der Euklidschen Quantenmechanik oder der Quantenstatistik ist $P(q)$ die Boltzmannverteilung (3.37). Eine einfache Gleichung, welche die Bedingung (4.7) beziehungsweise (4.19) impliziert, ist die *detaillierte Bilanzgleichung*: Die Wahrscheinlichkeit P_s einer Konfiguration s , multipliziert mit der Übergangswahrscheinlichkeit $W(s, s')$ in eine Konfiguration s' , ist gleich der Wahrscheinlichkeit für den inversen Prozess, beginnend mit der Konfiguration s' mit $P_{s'}$ und Übergangswahrscheinlichkeit $W(s', s)$, so dass

$$P_s W(s, s') = P_{s'} W(s', s). \quad (4.20)$$

Der Übergang von s nach s' ist wahrscheinlicher als der umgekehrte Prozess, wenn die Gleichgewichtsdichte bei s' größer ist als bei s . Die Wahrscheinlichkeitsverteilung P ist in der Tat ein Fixpunkt von W ,

$$\sum_s P_s W(s, s') = \sum_{s'} P_{s'} W(s', s) = P_{s'}. \quad (4.21)$$

Die Bedingung des detaillierten Gleichgewichts (4.20) legt W noch nicht fest. Man benutzt diese Freiheit in der Wahl um einen möglichst einfachen und schnellen Algorithmus zu finden. *Metropolis-* und *Wärmebadalgorithmus* sind besonders beliebt, weil sie fast immer einsetzbar sind. In den letzten Jahren spielen allerdings die sogenannten *Cluster-Algorithmen* eine zunehmend wichtige Rolle, da sie das „critical slowing down“ berücksichtigen. Eine Einführung in die Monte-Carlo Methode finden sie im Lehrbuch von NEWMAN und BARKENNA [26].

4.2.1 Akzeptanzrate

Die Übergangswahrscheinlichkeit $W(s, s')$ wird durch (4.20) nicht eingeschränkt und wir können eine Änderung der $W(s, s')$ durch Anpassung von $W(s, s)$ die Summenregel in (4.1) beibehalten. Wir schreiben nun die Übergangswahrscheinlichkeit als Produkt einer Selektions- oder Testwahrscheinlichkeit und einer Akzeptanzrate,

$$W(s, s') = T(s, s') A(s, s'). \quad (4.22)$$

Dabei ist $T(s, s')$ die Wahrscheinlichkeit, bei einem gegebenem Anfangszustand s den neuen Zustand s' zu testen. Starten wir mit s und testen s' , dann ist $0 \leq A(s, s') \leq 1$ die Wahrscheinlichkeit, dass die Änderung nach s' auch akzeptiert wird. Die Bedingung

für das detaillierte Gleichgewicht,

$$\frac{T(s, s')A(s, s')}{T(s', s)A(s', s)} = \frac{P_{s'}}{P_s}, \quad (4.23)$$

legt das Verhältnis der Akzeptanzraten nicht fest. Ein effizienter Monte-Carlo Algorithmus bedingt eine möglichst gute Wahl für dieser Raten. Sind sie nämlich sehr klein, dann werden nur wenige Änderungen angenommen und man bleibt im Anfangszustand „hängen“. Man verschwendet wertvolle Rechenzeit ohne den Zustandsraum zu durchlaufen. In der Praxis setzt man die grössere der Akzeptanzraten $A(\mu, \nu)$ und $A(\nu, \mu)$ gleich Eins und wählt die kleinere so, dass die Bilanzgleichung (4.23) erfüllt wird.

4.2.2 Hasting und Metropolis Methode

Bei diesem Algorithmus wird die Selektionswahrscheinlichkeit $T(s, s')$ für alle von s aus *erreichbaren* Zustände s' gleich gewählt [27]. Die Selektionswahrscheinlichkeiten der anderen Zustände ist Null. Bezeichnet $N \leq f$ die Anzahl erreichbarer Zustände, dann gilt

$$T(s, s') = \begin{cases} 1/N & s \rightarrow s' \text{ möglich} \\ 0 & \text{sonst.} \end{cases} \quad (4.24)$$

Als Akzeptanzrate wählt man

$$A(s, s') = \min \left(\frac{P_{s'} \cdot T(s', s)}{P_s \cdot T(s, s')}, 1 \right) \quad (4.25)$$

und dann erfüllt W in (4.22) die Bedingung für das detaillierte Gleichgewicht,

$$P_s T(s, s') \cdot \min \left(\frac{P_{s'} T(s', s)}{P_s T(s, s')}, 1 \right) = P_{s'} T(s', s) \cdot \min \left(\frac{P_s T(s, s')}{P_{s'} T(s', s)}, 1 \right),$$

wie man durch die Fallunterscheidung $P_{s'} T(s', s)$ kleiner oder größer als $P_s T(s, s')$ leicht nachprüft. Eine Verallgemeinerung dieser Methode stammt von Hasting [28]. Gegenüber dem einfachen und universell einsetzbaren Metropolis-Algorithmus kann damit unter Umständen eine beträchtliche Verbesserung erreicht werden.

Beim Metropolis-Algorithmus beginnt man mit einer Startkonfiguration s . Eine gute Anfangsbedingung kann unter Umständen viel Rechenzeit ersparen. Bei hohen Temperaturen wird man anfänglich die Variablen zufällig wählen, bei tiefen Temperaturen und in einer geordneten Phase dagegen stark korreliert.

Wir stellen nun eine Implementierung des Algorithmus für die Simulation von Gittersystemen, zum Beispiel eines diskretisierten quantenmechanischen Systems auf n Gitterpunkten, vor. Man wählt eine anfängliche Konfigurationen $q = (q_1, \dots, q_n)$ und verändert oder belässt die Variable q_1 auf dem ersten Gitterpunkt gemäß folgenden Regeln:

1. Zuerst ersetzt man q_1 versuchsweise durch eine zufällig ausgewähltes q'_1 .
2. Nimmt die Wirkung beim Übergang $q_1 \rightarrow q'_1$ ab, $\Delta S < 0$, so wird q_1 durch q'_1 ersetzt.
3. Nimmt die Wirkung zu, dann wählt man eine gleichverteilte Zufallszahl $r \in [0, 1]$ und der Vorschlag q'_1 wird nur angenommen wenn $\exp(-\Delta S) > r$ ist. Andernfalls ändert man die Gittervariable q_1 nicht.
4. Nun verfährt man mit den Variablen q_2, q_3, \dots auf den anderen Gitterplätzen analog, bis alle Variablen getestet sind.
5. Ist der letzte Gitterplatz erreicht, so ist ein „sweep“ über das Gitter oder eine *Monte-Carlo-Iteration* beendet und man fängt wieder mit dem ersten Gitterplatz an.

Bei einer realistischen Simulation streicht man zig-tausend mal übers Gitter, um statistische Fehler zu verkleinern.

Um nachzuprüfen, ob der Markovprozess in der Nähe der Gleichgewichtsverteilung ist, „misst“ man Erwartungswerte als Funktionen der Monte-Carlo-Zeit mit einer MC-Iteration als Zeiteinheit. Nachdem die Erwartungswerte nur noch statistisch schwanken, beginnt man die Observablen gemäß (3.38) zu messen.

2-Zustandssystem: Wir betrachten ein System mit zwei Zuständen,

$$H |1\rangle = E_1 |1\rangle \quad \text{und} \quad H |2\rangle = E_2 |2\rangle, \quad \Delta E = E_2 - E_1 > 0. \quad (4.26)$$

Beim Übergang $|2\rangle \rightarrow |1\rangle$ wird die Energie erniedrigt, so dass $W(2, 1) = 1$ ist. Andererseits ist die Anregungswahrscheinlichkeit $W(1, 2)$ gleich dem Boltzmannfaktor

$$b_{21} = e^{-\beta(E_2 - E_1)} < 1.$$

Deshalb ist die stochastische Matrix

$$W = \begin{pmatrix} 1 - b_{21} & b_{21} \\ 1 & 0 \end{pmatrix}. \quad (4.27)$$

Die Potenzen dieser Matrix lauten

$$W^n = \frac{1}{1+b_{21}} \begin{pmatrix} 1+(-b_{21})^{n+1} & b_{21}(1+(-b_{21})^n) \\ 1+(-b_{21})^n & b_{21}(1+(-b_{21})^{n-1}) \end{pmatrix},$$

und sie konvergieren exponentiell schnell gegen die stochastische Matrix

$$W^\infty = \frac{1}{1+b_{21}} \begin{pmatrix} 1 & b_{21} \\ 1 & b_{21} \end{pmatrix} = \frac{1}{Z} \begin{pmatrix} e^{-\beta E_1} & e^{-\beta E_2} \\ e^{-\beta E_1} & e^{-\beta E_2} \end{pmatrix}. \quad (4.28)$$

Hier bezeichnet Z die Zustandssumme des 2-Zustandssystems $Z = \exp(-\beta E_1) + \exp(-\beta E_2)$. Entsprechend konvergiert jede anfängliche Wahrscheinlichkeitsverteilung $\mathbf{p} = (p_1, p_2)$ gegen die Boltzmannverteilung

$$\mathbf{p} \longrightarrow \mathbf{P} = \frac{1}{Z} (e^{-\beta E_1}, e^{-\beta E_2}). \quad (4.29)$$

3-Zustandssystem: Es seien $|i\rangle$ die drei Energieeigenzustände mit Energien $E_1 < E_2 < E_3$. Die stochastische Matrix hat die Form

$$W = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 2-b_{21}-b_{31} & b_{21} & b_{31} \\ 1 & 1-b_{32} & b_{32} \\ 1 & 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad b_{pq} = e^{-\beta(E_p-E_q)}, \quad (4.30)$$

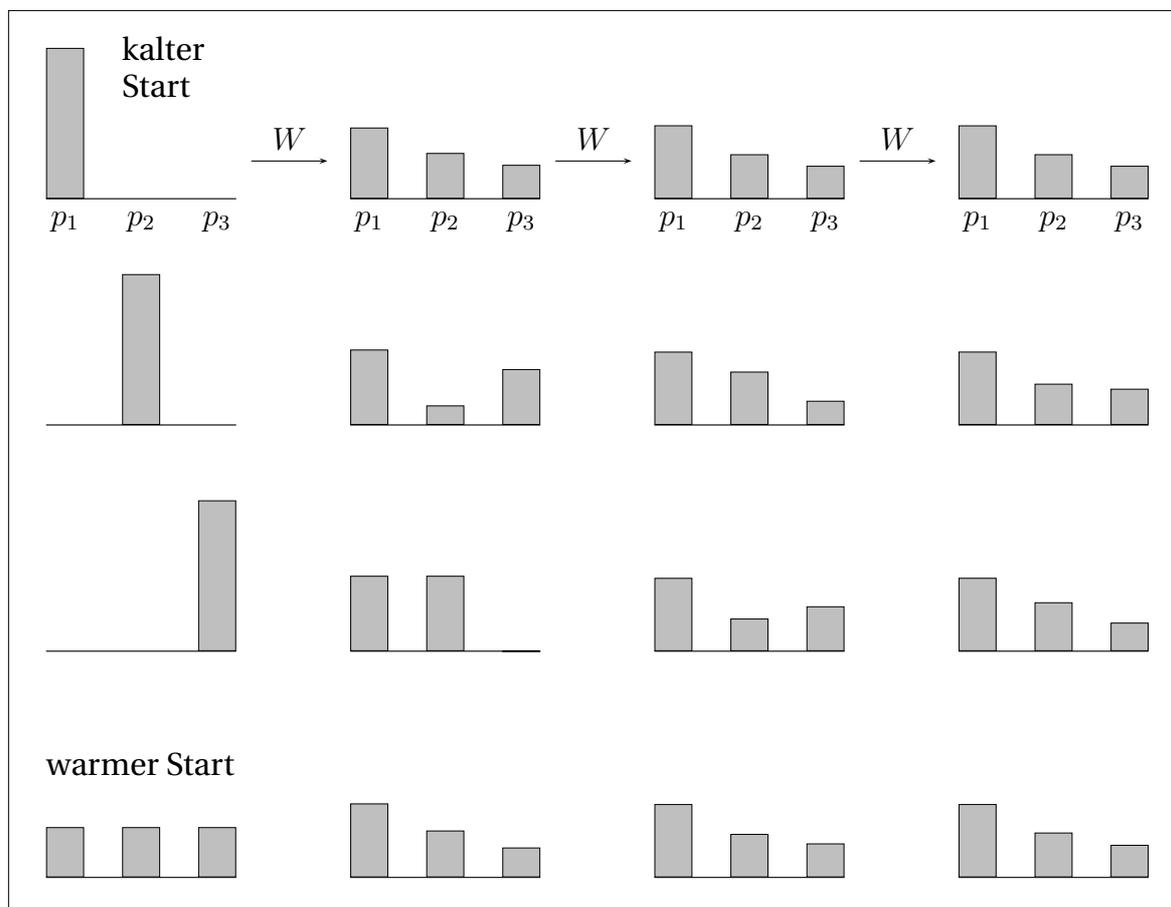
und ihre Potenzen konvergieren gegen

$$W^\infty = \frac{1}{Z} \begin{pmatrix} e^{-\beta E_1} & e^{-\beta E_2} & e^{-\beta E_3} \\ e^{-\beta E_1} & e^{-\beta E_2} & e^{-\beta E_3} \\ e^{-\beta E_1} & e^{-\beta E_2} & e^{-\beta E_3} \end{pmatrix}. \quad (4.31)$$

Deshalb konvergiert jede Anfangsverteilung gegen die Boltzmannverteilung.

$$\mathbf{P} = \frac{1}{Z} (e^{-\beta E_1}, e^{-\beta E_2}, e^{-\beta E_3}). \quad (4.32)$$

Die folgende Abbildung zeigt das Streben ins Gleichgewicht für vier unterschiedliche Anfangsverteilungen. Es wurden die Energiedifferenzen $E_2 - E_1 = 0.5$ und $E_3 - E_2 = 0.3$ gewählt.



Für den „kalten Start“ mit Grundzustand als Anfangszustand und den „warmen Start“ mit gleichverteilten Anfangswahrscheinlichkeiten ist die Konvergenz besonders gut. Startet man im Zustand mit größter Energie, dann ist die Konvergenz am schlechtesten.

4.2.3 Wärmebad-Methode

Bei dieser Methode hängt die Übergangswahrscheinlichkeit $W(s, s')$ nur vom Endzustand s' ab. Wegen der Bilanzgleichung (4.20) ist dann $W(s, s') \propto P_{s'}$ und mit den Normierungsbedingungen an P und W folgt

$$W(s, s') = P_{s'}. \quad (4.33)$$

In dieser Form eignet sich die Methode besonders gut wenn die Gleichgewichtsverteilung leicht integriert beziehungsweise summiert werden kann. Wir illustrieren dies anhand der Berechnung der eindimensionalen Integrale $\langle O \rangle = \int O(x)P(x)dx$, wozu wir nach $P(x)$ verteilte Zufallszahlen generieren wollen. Zu deren Erzeugung

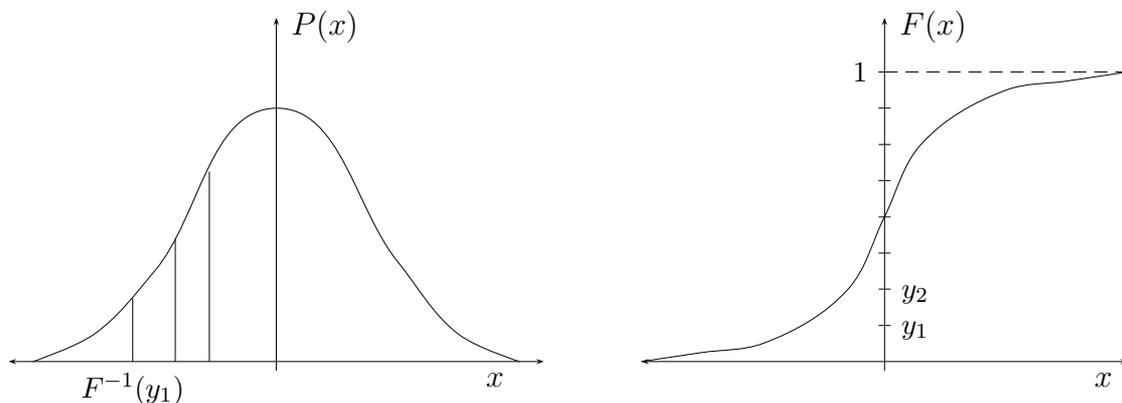
betrachten wir die monoton wachsende Stammfunktion

$$F(x) = \int_{-\infty}^x P(y) dy \in [0, 1]$$

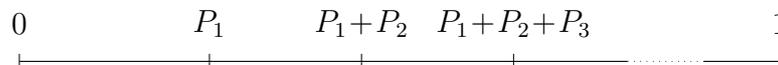
der Wahrscheinlichkeitsdichte und erzeugen gleichverteilte Zufallszahlen y_i im Wertebereich $[0, 1]$ der Stammfunktion. Wegen

$$y_2 - y_1 = \int_{F^{-1}(y_1)}^{F^{-1}(y_2)} P(y) dy$$

sind deren Urbilder $\{F^{-1}(y_i)\}$ nach P verteilt, wie in folgender Abbildung skizziert.



Für ein System mit einer endlichen Anzahl Zustände ist die Stammfunktion eine Treppenfunktion. Wir ordnen die Systemzustände $s = \{1, 2, \dots, n\}$ nach ihren Wahrscheinlichkeiten, $P_1 \geq P_2 \geq \dots \geq P_n$.



Bei der direkten Wärmebadmethode lautet dann eine mögliche Implementierung wie folgt:

1. Ziehe eine gleichverteilte Zufallszahl $r \in [0, 1]$.
2. Ist $r < P_1$, dann wird die erste Konfiguration mit $s = 1$ gewählt. Gehe zu 1.
3. Andernfalls, falls $r < P_1 + P_2$, wird die zweite Konfiguration gewählt. Gehe zu 1.
4. und so weiter.

Die stochastische Matrix für diesen einfachen Algorithmus ist ideal,

$$W = \begin{pmatrix} P_1 & P_2 & \dots & P_n \\ P_1 & P_2 & \dots & P_n \\ \vdots & \vdots & \dots & \vdots \\ P_1 & P_2 & \dots & P_n \end{pmatrix} \implies W^2 = W. \quad (4.34)$$

Der Algorithmus hat aber einen grossen Nachteil: Er ist in dieser Form nur auf diskrete und relativ kleine Systeme anwendbar und wird langsam für eine zunehmende Anzahl Zustände. Sind die Konfigurationen Boltzmann-verteilt, so muss man die Zustandssumme kennen, um die Wahrscheinlichkeiten zu berechnen.

Für kontinuierliche Variablen kann der Algorithmus modifiziert werden. Dazu wählt man den Metropolis-Algorithmus für die bedingten Wahrscheinlichkeiten der gemeinsamen Verteilung $P(q)$. Man beginnt mit der Dichte $P(q_1|q_2, \dots, q_n)$ für die Wahrscheinlichkeit von q_1 bei festgehaltenen q_2, \dots, q_n . Eine einfache Iteration, ausgehend von der Konfiguration q zur MC-Zeit $t = 1$, wäre zum Beispiel zur Zeit $t = 2$

$$\begin{aligned} q_1(2) &\sim P(q_1|q_2(1), q_3(1), \dots, q_n(1)) \\ q_2(2) &\sim P(q_2|q_1(2), q_3(1), \dots, q_n(1)) \\ q_3(2) &\sim P(q_3|q_1(2), q_2(2), \dots, q_n(1)) \\ &\vdots \quad \sim \quad \vdots \\ q_n(2) &\sim P(q_n|q_1(2), q_2(2), \dots, q_{n-1}(2)). \end{aligned}$$

Hier bedeutet $q_1(2) \sim P(q_1|q_2(1), q_3(1), \dots, q_n(1))$, dass das neue q_1 entsprechend der bedingten Wahrscheinlichkeit $P(\dots)$ zu wählen ist. Wir werden später eine Implementierung dieses Algorithmus für spezielle Systeme, zum Beispiel Spinmodelle, besprechen.

4.3 Anharmonischer Oszillator

Wir untersuchen eindimensionale Systeme mit diskretisierter Euklidischer Wirkung

$$S = \epsilon \sum_{j=0}^{n-1} \left\{ \frac{m}{2} \frac{(q_{j+1} - q_j)^2}{\epsilon^2} + V(q_j) \right\}. \quad (4.35)$$

Insbesondere betrachten wir hier den anharmonischen Oszillator

$$V(q) = \mu q^2 + \lambda q^4. \quad (4.36)$$

Bei den Simulationen, deren Resultate unten angegeben werden, hatte das Raumgitter etwa 1000 Gitterpunkte. Die Wahl von n und ϵ ist durch zwei Gesichtspunkte eingeschränkt:

- ϵ muss genügend klein sein um dem Kontinuums-Limes nahe zu kommen.
- Die Größen von Interesse müssen ins Volumen $n\epsilon$ passen. Zum Beispiel sollte die Breite des Grundzustandes kleiner als $n\epsilon$ sein.

Definiert man eine typische physikalische Skala λ_0 des Systems, so werden wir

$$\epsilon \leq \frac{\lambda_0}{10} \quad \text{und} \quad n\epsilon \geq 10\lambda_0 \quad (4.37)$$

fordern. Ein weiteres Problem ist die Größe der *statistischen Fluktuationen*. Für eine Observable O sind die relativen Streuungen um den Mittelwert $\langle O \rangle$ etwa

$$\Delta_O = \sqrt{\frac{\langle O^2 \rangle}{\langle O \rangle^2} - 1} \sim (\text{Anz. Gitterpunkte})^{-1/2}. \quad (4.38)$$

Zur Schätzung der Erwartungswerte mitteln wir nach (3.38) über identische Gitter,

$$\bar{O} = \frac{1}{M} \sum_{\mu=1}^M O(\mathbf{q}_\mu). \quad (4.39)$$

Es braucht einige Zeit, gemessen in Metropolis-Iterationen, bis das Gleichgewicht erreicht ist, d.h. bis der Markovprozeß konvergiert. Für den anharmonischen Oszillator und die gewählten Gitterabstände ϵ ist bei vernünftiger Wahl der Anfangsbedingung das Gleichgewicht nach etwa 10 – 100 Iterationen erreicht. Die danach erzeugten Gitterkonfigurationen werden bei der Auswertung berücksichtigt. Da aber die Konfigurationen aufeinander folgender Sweeps korreliert sind, wird nur jeder MA 'te Sweep durch das Gitter ausgewertet. Will man M Konfigurationen auswerten dann müssen also $M \cdot MA$ Konfigurationen erzeugt werden. Mit wachsender *Autokorrelationszeit* muss MA grösser gewählt werden. Für den anharmonischen Oszillator und die unten gewählten Modellparameter ist $MA = 5$ eine sinnvolle Wahl. Die Autokorrelationszeit hängt auch von der zu betrachteten Observablen ab. In Gitterfeldtheorien kann sie für räumlich gemittelte Grössen gross werden.

Gemessen werden die Korrelationsfunktionen

$$\overline{q_i^2}, \quad \overline{q_i^4} \quad \text{und} \quad \overline{q_i q_{i+m}}.$$

Damit kann man schon die niedrigsten Energien bestimmen. Zur Berechnung der Grundzustandsenergie benutzen wir den *Virialsatz* (wir folgen hier Creutz und Freedman [30])

$$\frac{1}{2m} \langle 0 | \hat{p}^2 | 0 \rangle = \frac{1}{2} \langle 0 | \hat{q} V'(\hat{q}) | 0 \rangle, \quad (4.40)$$

so dass gilt

$$E_0 = \langle 0 | \frac{1}{2} \hat{q} V'(\hat{q}) + V(\hat{q}) | 0 \rangle = \frac{1}{Z} \int \mathcal{D}q e^{-S[q]} \left(\frac{1}{2} q V'(q) + V(q) \right). \quad (4.41)$$

Für die Energie des ersten angeregten Zustands finden wir mit (2.66) den Ausdruck

$$E_1 = -\frac{1}{\Delta\tau} \lim_{\tau \rightarrow \infty} \log \frac{\langle 0 | q_E(\tau + \Delta\tau) q(0) | 0 \rangle}{\langle 0 | q_E(\tau) q_E(0) | 0 \rangle} + E_0. \quad (4.42)$$

Um die Wellenfunktion des Grundzustandes zu berechnen, benutzen wir

$$K(\tau, q', q) = \sum_n e^{-\tau E_n} \psi_n(q') \psi_n(q), \quad (4.43)$$

wobei ψ_n die reellen und normierten Eigenfunktionen von H sind. Für grosse euklidische Zeiten und festgehaltene Endpunkte $q' = q$ kann man aus

$$\lim_{\tau \rightarrow \infty} \frac{K(\tau, q, q)}{\int dq K(\tau, q, q)} = |\psi_0(q)|^2 \quad (4.44)$$

die Aufenthaltswahrscheinlichkeit des Teilchens (im Grundzustand) im Intervall $[q, q + \Delta q]$ berechnen. Dazu zählt man in jeder gemessenen MC-Konfiguration den Anteil Koordinaten q_i die im untersuchten Intervall liegen. Diese relative Häufigkeit bestimmt man für jeden Bin in der Unterteilung des interessierenden q -Gebiets in kleine Intervalle der Länge Δ und für viele Konfigurationen.

Reskalieren wir die Konstanten (m, μ, λ) in (4.35,4.36) und die Koordinaten mit Potenzen von ϵ und führen die dimensionslosen Gittergrößen (m_L, μ_L, λ_L) ein

$$q_L = q/\epsilon, \quad m_L = \epsilon m, \quad \mu_L = \epsilon^3 \mu \quad \text{und} \quad \lambda_L = \epsilon^5 \lambda, \quad (4.45)$$

dann vereinfacht sich der Ausdruck für die Gitterwirkung,

$$S(\mathbf{q}) = \sum_{j=0}^{n-1} \left\{ \frac{m_L}{2} (q_{j+1} - q_j)_L^2 + \mu_L q_{j,L}^2 + \lambda_L q_{j,L}^4 \right\}. \quad (4.46)$$

Die Differenz der Wirkungen zweier Konfigurationen q' und q , welche sich nur in der j 'ten Variablen unterscheiden, ist

$$S(q') - S(q) \approx (q'_j - q_j)_L \left\{ -m_L(q_{j+1} + q_{j-1})_L + (q'_j + q_j)_L \{m_L + \mu_L + \lambda_L(q_j'^2 + q_j^2)_L\} \right\}. \quad (4.47)$$

Der Nachteil dieser Methode ist, dass wir physikalische Grössen in Einheiten der unphysikalischen und in $S(q)$ nicht mehr auftretenden Länge ϵ messen. Man muss zuerst eine physikalische Grösse (zum Beispiel eine Masse oder Energie) berechnen und mit dem „experimentellen“ Wert vergleichen und kann erst danach eine Skala festlegen.

Alternativ können wir alle dimensionsbehafteten Grössen in Einheiten einer festen Einheitslänge ℓ messen:

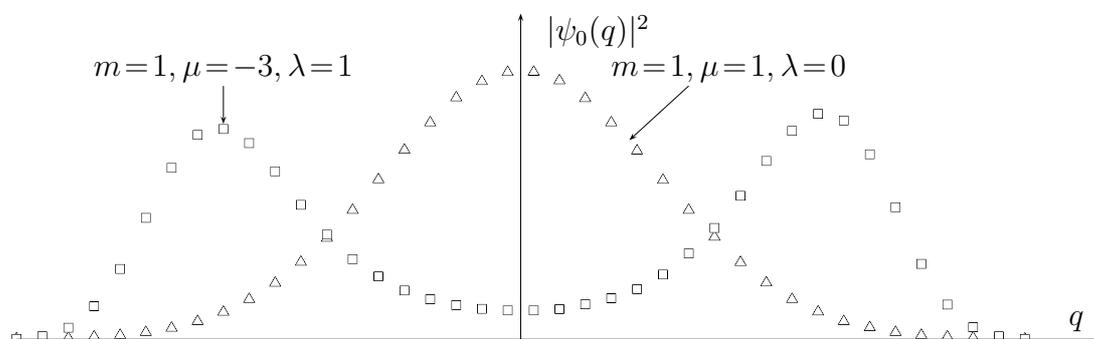
$$\epsilon = a\ell, \quad q = \tilde{q}\ell, \quad m = \tilde{m}/\ell, \quad \mu = \tilde{\mu}/\ell^3 \quad \text{und} \quad \lambda = \tilde{\lambda}/\ell^5. \quad (4.48)$$

Dann ist

$$S(q') - S(q) = (\tilde{q}'_j - \tilde{q}_j) \left\{ -\frac{\tilde{m}}{a}(\tilde{q}_{j+1} + \tilde{q}_{j-1}) + (\tilde{q}'_j + \tilde{q}_j) \left(\frac{\tilde{m}}{a} + a\tilde{\mu} + a\tilde{\lambda}(\tilde{q}_j'^2 + \tilde{q}_j^2) \right) \right\}. \quad (4.49)$$

Diese Formel wurde im Programm `anharmonic1.c` auf Seite 77 bei der Definition der Funktion `deltaS` in der Header-datei `stdanho.h` auf Seite 79 benutzt. Die Modellparameter m, μ und λ , die Anzahl Gitterpunkte N und die Gitterkonstante a sind in `constants.h` auf Seite 78 als Konstanten abgelegt und können leicht geändert werden. Nur jede MA 'te Iteration wird gemessen, und zwar erst ab der $MA \cdot MG$ 'ten Iteration. Das Quadrat der Wellenfunktion wird auf $[-INTERV, INTERV]$ gebinnt, und die Anzahl Bins ist BIN . Mit dem Parameter `DELTA` stellt man ein, wie sehr eine Koordinate versuchsweise abgeändert wird, $q' = q + DELTA \cdot (1 - 2r)$, wobei r eine gleichverteilte Zufallszahl in $[0, 1]$ ist. Das Programm gibt als Wertepaare das Histogramm der Wahrscheinlichkeitsverteilung aus. Der q -Bereich geht von $-INTERV$ bis $INTERV$, auf BIN Bins verteilt. Die Anzahl Punkte im Histogramm ist gleich der Anzahl N der Gitterpunkte.

In der folgenden Abbildung haben wir die Wahrscheinlichkeitsdichte $|\psi_0(q)|^2$ für den harmonischen und anharmonischen Oszillator geplottet.



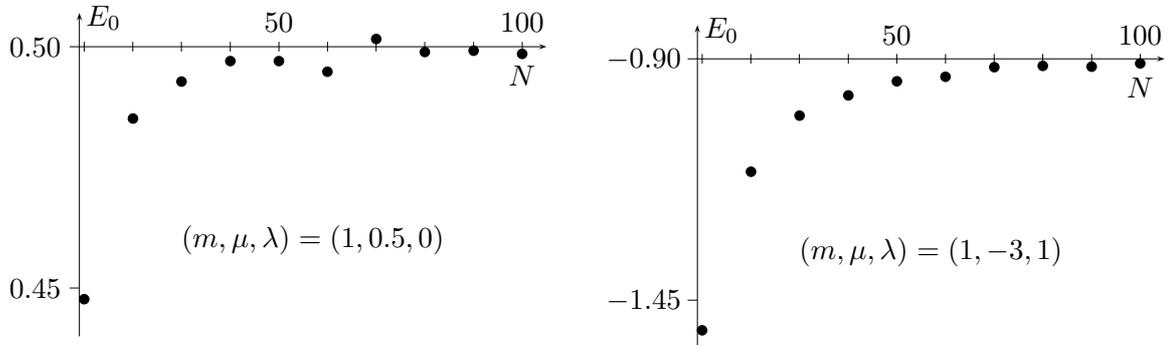
Das sehr ähnliche Programm `anharmonic2.c` auf der Seite 77 berechnet die Grundzustandsenergie E_0 mit Hilfe des Virialsatzes (4.41). Dabei wurden bei festgehalten-der physikalischer Länge Na (in Einheiten von ℓ) die Anzahl Gitterpunkte oder äquivalent dazu die Gitterkonstante verändert. Bereits für $a \sim 0.2$ ist man dem Kontinuums- $limes$ $a \rightarrow 0$ nahe. Die Abhängigkeit der Grundzustandsenergien des harmonischen- und anharmonischen Oszillators von der Gitterkonstante finden sie in der folgenden Tabelle. Die Werte der Gitterkonstante sind $a = 1, 1/2, 1/3, \dots, 1/10$ und für die Kopplungskonstanten wurde $(m, \mu) = (1, 1/2)$ beziehungsweise $(m, \mu, \lambda) = (1, -3, 1)$ gewählt. Bei allen Rechnungen wurde das Volumen aN festgehalten, $aN = 10$.

a	$E_0(1, 0.5, 0)$	Wick	$E_0(\text{exakt})$	$E_0(1, -3, 1)$
1	0.4477	-0.0008	0.4473	-1.4624
1/2	0.4851	0.0010	0.4851	-1.1339
1/3	0.4928	0.0016	0.4932	-1.0177
1/4	0.4926	0.0014	0.4962	-0.9758
1/5	0.4970	0.0040	0.4976	-0.9466
1/6	0.4948	0.0006	0.4983	-0.9369
1/7	0.5016	0.0003	0.4988	-0.9173
1/8	0.4989	0.0067	0.4991	-0.9144
1/9	0.4992	0.0012	0.4993	-0.9160
1/10	0.4985	0.0009	0.4994	-0.9097

(4.50)

Die folgenden zwei Abbildungen zeigen, dass sich die Grundzustandsenergien für $a < 0.2$ nur noch wenig ändern. Die Extrapolation zum Kontinuum $a \rightarrow 0$ ergeben für die gewählten Massen und Kopplungskonstanten die Schätzwerte $E_0(\text{harm. Os}) \approx$

0.50 und $E_0(\text{anharm. Osz.}) \approx -0.91$. Der exakte Wert für den harmonischen Oszillator ist $E_0 = 0.5$.



Für den harmonischen Oszillator gilt die Wick-Relation

$$\langle 0 | \hat{q}^4 | 0 \rangle - 3 \langle 0 | \hat{q}^2 | 0 \rangle^2 = 0.$$

In der obigen Tabelle haben wir den Schätzwert für die linke Seite in der Spalte mit dem Namen „Wick“ gelistet. Die Abweichung von Null ist ein Maß für die Güte der Monte-Carlo-Simulation.

4.4 Hybrid-Monte-Carlo Algorithmus

Der Hybrid-Monte-Carlo (HMC) Algorithmus wurde erstmalig von S. Duane et al. in [29] vorgestellt. Wir folgen hier den Darstellungen in [31] und [32]. Der HMC-Algorithmus ist eine Kombination aus der Molekuldynamik-Methode und dem Metropolis Algorithmus. Ziel ist es, ein globales update der Konfigurationen durchzuführen und gleichzeitig eine vernünftige Akzeptanzrate zu erhalten, damit der Rechenaufwand für die Generierung unabhängiger Konfigurationen möglichst klein ist.

Die Molekular-Dynamik (MD) Methode wird erfolgreich bei der Untersuchung von klassischen Vielteilchensystemen eingesetzt. Anwendungen findet sie zum Beispiel in der Materialwissenschaft, Astrophysik oder der Untersuchung von Biomolekülen. Dabei werden die Hamiltonschen Bewegungsgleichungen numerisch integriert und die ergodische Hypothese vorausgesetzt, nach der das statistische Ensemblemittel durch das Zeitmittel ersetzt werden kann. Aus einem Anfangszustand (q_0, p_0) erhält man durch Integration der Bewegungsgleichungen im Phasenraum

$$\dot{q}_i = \frac{\partial H}{\partial p_i} \quad , \quad \dot{p}_i = -\frac{\partial H}{\partial q_i} \quad (4.51)$$

den eindeutigen Zustand zu jedem späteren Zeitpunkt. Ohne numerische Fehler wäre für konservative Systeme die Energie eine Konstante der Bewegung.

Um nun bei einem Makroprozess globale Updates und hohe Akzeptanzrate zu verbinden, benutzt man die Modell-Hamiltonfunktion

$$H(\mathbf{q}, \mathbf{p}) = \frac{1}{2} \sum_{x \in \Lambda} p_x^2 + S(\mathbf{q}), \quad \mathbf{q} = (q_1, \dots, q_n), \quad (4.52)$$

in einem erweiterten Phasenraum. In der diskretisierten Quantenmechanik mit n Gitterpunkten in der euklidischen Zeitrichtung hat der künstlich eingeführte Phasenraum die Dimension $2n$. Jedem diskretisierten Weg \mathbf{q} und jedem Impuls \mathbf{p} im erweiterten Phasenraum wird die „Energie“ H zugeordnet. Bei der Zeit in der Hamiltonschen Dynamik handelt es sich nicht um die physikalische Zeit des Systems wie bei der molekularen Dynamik, sondern um eine fiktive „Computer-Zeit“.

Durch die Integration der Bewegungsgleichungen über die „künstliche Zeit“ τ wird aus der Konfiguration (\mathbf{q}, \mathbf{p}) die Konfiguration (\mathbf{q}, \mathbf{p}) deterministisch berechnet. Das Paar (\mathbf{q}, \mathbf{p}) wird dann mit der Wahrscheinlichkeit

$$A(\mathbf{q}, \mathbf{p} \rightarrow \mathbf{q}', \mathbf{p}') = \min \{1, \exp(H(\mathbf{q}, \mathbf{p}) - H(\mathbf{q}', \mathbf{p}'))\} \quad (4.53)$$

akzeptiert. Für eine exakte Integration wäre diese Wahrscheinlichkeit immer gleich 1 und die neue Konfiguration (\mathbf{q}, \mathbf{p}) würde akzeptiert werden. Bei einer numerischen Integration ist der Wert von H allerdings nur bis auf einen Diskretisierungsfehler erhalten und A kann kleiner 1 werden. Wir werden weiterhin fordern, dass die Impulse Gaußsch verteilt sind,

$$P_G(\mathbf{p}) = \mathcal{N} e^{-\frac{1}{2} \sum_x p_x^2} \quad (4.54)$$

mit einer Normierungskonstanten \mathcal{N} . Dann kann gezeigt werden, dass der entsprechende Markovprozeß die Bedingung für das detaillierte Gleichgewicht erfüllt. Dies wollen wir jetzt beweisen.

Zunächst müssen wir die Übergangswahrscheinlichkeit von \mathbf{q} nach \mathbf{q}' berechnen. Wegen der Zeitumkehrinvarianz der Hamiltonschen Bewegungsgleichungen gilt für die Wahrscheinlichkeit T durch die Integration der Bewegungsgleichungen von der Konfiguration (\mathbf{q}, \mathbf{p}) zur Konfiguration (\mathbf{q}, \mathbf{p}) zu gelangen, folgende Gleichheit:

$$T(\mathbf{q}, \mathbf{p} \rightarrow \mathbf{q}', \mathbf{p}') = T(\mathbf{q}', -\mathbf{p}' \rightarrow \mathbf{q}, -\mathbf{p}). \quad (4.55)$$

Diese Bedingung wird für den Beweis benötigt, und deshalb sollte der in den Simulationen eingesetzte Integrator reversibel sein. Nun berechnen wir aus mit (4.53) und

(4.54) die Übergangswahrscheinlichkeiten $W(\mathbf{q}, \mathbf{q}')$ wie folgt,

$$W(\mathbf{q}, \mathbf{q}') = \int \mathcal{D}\mathbf{p}\mathcal{D}\mathbf{p}' P_G(\mathbf{p}) T(\mathbf{q}, \mathbf{p} \rightarrow \mathbf{q}', \mathbf{p}') A(\mathbf{q}, \mathbf{p} \rightarrow \mathbf{q}', \mathbf{p}'). \quad (4.56)$$

Die Bedingung für das detaillierte Gleichgewicht lautet

$$e^{-S(\mathbf{q})} W(\mathbf{q}, \mathbf{q}') = e^{-S(\mathbf{q}')} W(\mathbf{q}', \mathbf{q}). \quad (4.57)$$

Die linke Seite der Bedingung ist

$$e^{-S(\mathbf{q})} W(\mathbf{q}, \mathbf{q}') = \mathcal{N} \int \mathcal{D}\mathbf{p}\mathcal{D}\mathbf{p}' e^{-H(\mathbf{q}, \mathbf{p})} T(\mathbf{q}, \mathbf{p} \rightarrow \mathbf{q}', \mathbf{p}') A(\mathbf{q}, \mathbf{p} \rightarrow \mathbf{q}', \mathbf{p}'). \quad (4.58)$$

Ähnlich wie beim Beweis der Bedingung im Monte-Carlo-Algorithmus im Unterabschnitt 4.2.2 kann man wegen der Form von A zeigen, daß gilt

$$e^{-H(\mathbf{q}, \mathbf{p})} A(\mathbf{q}, \mathbf{p} \rightarrow \mathbf{q}', \mathbf{p}') = e^{-H(\mathbf{q}', \mathbf{p}')} A(\mathbf{q}', \mathbf{p}' \rightarrow \mathbf{q}, \mathbf{p}).$$

Verwendet man diese Beziehung in (4.58) und berücksichtigt noch, dass H und A gerade Funktionen der Impulse sind, dann folgt

$$\begin{aligned} e^{-S(\mathbf{q})} W(\mathbf{q}, \mathbf{q}') &= \mathcal{N} \int \mathcal{D}\mathbf{p}\mathcal{D}\mathbf{p}' e^{-H(\mathbf{q}', \mathbf{p}')} T(\mathbf{q}, \mathbf{p} \rightarrow \mathbf{q}', \mathbf{p}') A(\mathbf{q}, \mathbf{p} \rightarrow \mathbf{q}', \mathbf{p}') \\ &= \mathcal{N} \int \mathcal{D}\mathbf{p}\mathcal{D}\mathbf{p}' e^{-H(\mathbf{q}', \mathbf{p}')} T(\mathbf{q}', \mathbf{p}' \rightarrow \mathbf{q}, \mathbf{p}) A(\mathbf{q}', \mathbf{p}' \rightarrow \mathbf{q}, \mathbf{p}) \\ &= e^{-S(\mathbf{q}')} W(\mathbf{q}', \mathbf{q}). \end{aligned}$$

Der Beweis macht deutlich, warum die Wahrscheinlichkeitsverteilung der Impulse nicht beliebig sein darf. $P_G(\mathbf{p}) \cdot \exp(-S(\mathbf{q}))$ muss proportional zu $\exp(-H(\mathbf{q}, \mathbf{p}))$ sein. Wegen der Form der Hamiltonfunktion müssen die Impulse gaussverteilt sein.

Wir haben betont, dass der Integrator zur numerischen Lösung der fiktiven Hamiltonschen Dynamik reversibel sein sollte um die Bedingung für das detaillierte Gleichgewicht gewährleisten. Ein reversibler Algorithmus ist der *leap-frog Algorithmus*. Dabei werden zunächst die Impulse einen halben Zeitschritt integriert. Dann werden jeweils abwechselnd die Impulse und Koordinaten integriert, um abschließend noch einmal einen Halbschritt im Impulsraum zu berechnen. Die diskretisierten Bewegungsgleichungen mit Vorwärtsableitung $\dot{f}(\tau)\Delta\tau = f(\tau + \Delta\tau) - f(\tau)$ führen auf

$$\mathbf{q}(\tau + \Delta\tau) = \mathbf{q}(\tau) + \Delta\tau \mathbf{p}(\tau)$$

$$\mathbf{p}(\tau + \Delta\tau) = \mathbf{p}(\tau) - \Delta\tau S_{,q}(\mathbf{q}(\tau)) \quad (4.59)$$

Implementierung des HMC-Algorithmus: Die Integration soll über ein „Zeitintervall“ $\tau = N\Delta\tau$ ausgeführt werden. Aus einer anfänglichen Konfiguration $(\mathbf{q}(0), \mathbf{p}(0))$ werden $\mathbf{q}(n\Delta\tau) \equiv \mathbf{q}(n)$ und $\mathbf{p}((n + \frac{1}{2})\Delta\tau) \equiv \mathbf{p}(n + \frac{1}{2})$ wie folgt generiert:

1. Man beginne mit einer anfänglichen Konfiguration $\mathbf{q}(0)$. Je nach Temperatur oder Stärke der Kopplungskonstante wählt man meist einen warmen oder kalten Start.
2. Erzeugung von kanonisch konjugierten Impulskomponenten (p_1, \dots, p_n) die mit Varianz 1 und Mittelwert 0 gaussverteilt sind.
3. Berechnung eines Halbschrittes für \mathbf{p} :

$$\mathbf{p}(\frac{1}{2}) = \mathbf{p}(0) - \frac{\Delta\tau}{2} S_{,q}(\mathbf{q}(0)). \quad (4.60)$$

4. Iteration der beiden folgenden Schritte

$$\begin{aligned} a) \quad & \mathbf{q}(k) = \mathbf{q}(k-1) + \Delta\tau \mathbf{p}(k - \frac{1}{2}), \quad k = 1, 2, \dots, N \\ b) \quad & \mathbf{p}(k + \frac{1}{2}) = \mathbf{p}(k - \frac{1}{2}) - \Delta\tau S_{,q}(\mathbf{q}(k)), \quad k = 1, \dots, N-1. \end{aligned} \quad (4.61)$$

5. Berechnung des abschließenden Halbschrittes:

$$\mathbf{p}(N) = \mathbf{p}(N - \frac{1}{2}) - \frac{\Delta\tau}{2} S_{,q}(\mathbf{q}(N)). \quad (4.62)$$

6. Akzeptiere die neue Konfiguration $(\mathbf{q}', \mathbf{p}') = (\mathbf{q}(N), \mathbf{p}(N))$ mit der Wahrscheinlichkeit (4.53).

7. Beginne wieder mit der neuen oder der alten Konfiguration bei Schritt zwei.

Der so generierte Markovprozess strebt gegen die Boltzmannverteilung. Allerdings ist wegen der unvermeidlichen Rundungfehler die Reversibilität des leap-frog Integrators nicht exakt gegeben. Ein Test für die Korrektheit der Impementation macht davon Gebrauch, dass die Abbildung $\mathbf{q}, \mathbf{p} \rightarrow \mathbf{q}', \mathbf{p}'$ im Phasenraum volumenerhaltend ist, $\mathcal{D}\mathbf{q}\mathcal{D}\mathbf{p} = \mathcal{D}\mathbf{q}'\mathcal{D}\mathbf{p}'$. Deshalb gilt

$$\int \mathcal{D}\mathbf{q}'\mathcal{D}\mathbf{p}' e^{-H(\mathbf{q}', \mathbf{p}')} = \int \mathcal{D}\mathbf{q}\mathcal{D}\mathbf{p} e^{-H(\mathbf{q}, \mathbf{p}) - \Delta H(\mathbf{q}, \mathbf{p})}, \quad (4.63)$$

wobei $\Delta H(\mathbf{q}, \mathbf{p}) = H(\mathbf{q}', \mathbf{p}') - H(\mathbf{q}, \mathbf{p})$ die Energieänderung nach N Zeitschritten ist. Daraus folgt nun unmittelbar

$$1 = \langle e^{-\Delta H} \rangle \geq e^{-\langle \Delta H \rangle}, \quad (4.64)$$

wobei die *Jensen-Ungleichung* aus der Konvexität der Exponentialfunktion folgt.

Beim HMC gibt es zwei einstellbare Parameter, mit deren Hilfe sich die Effizienz bei gegebenen Volumen beeinflussen lässt: Dies sind die Trajektorienlänge $\tau = N\Delta\tau$ und die Schrittweite $\Delta\tau$.

In einem leap-frog Integrationsschritt wird die Energieerhaltung wegen der Diskretisierungsfehler verletzt [33],

$$\Delta H \propto (\Delta\tau)^3 + O((\Delta\tau)^4), \quad (4.65)$$

und der Erwartungswert von ΔH bei konstantem τ und $N > 0$ zeigt folgende Abhängigkeit vom Volumen V und der Schrittweite $\Delta\tau$,

$$\langle \Delta H \rangle \propto V(\Delta\tau)^4. \quad (4.66)$$

Über die Schrittweite lässt sich bei festem Volumen die Akzeptanzrate des HMC so einstellen, und zwar für beliebiges τ . Je größer τ gewählt wird, desto unkorrelierter sind die erzeugten Konfigurationen. Gleichzeitig steigt der Rechenaufwand zur Erzeugung einer Konfiguration. Wie immer gilt es, hier einen vernünftigen Kompromiss zu finden.

4.4.1 HMC für den anharmonischen Oszillator

Die Übertragung des HMC Algorithmus auf den anharmonischen Oszillator ist einfach, da der Modell-Hamiltonian die einfache Form

$$H = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^N p_i^2 + S(\mathbf{q}), \quad S(\mathbf{q}) = \frac{1}{2} \sum_i ((q_{i+1} - q_i)^2 + \omega^2 q_i^2 + 2q_i^4) \quad (4.67)$$

hat. Man erhält folgende Hamiltonschen Bewegungsgleichungen

$$\begin{aligned} \dot{q}_i &= p_i \\ \dot{p}_i &= -(2q_i - q_{i-1} - q_{i+1} + \omega^2 q_i + 4q_i^3). \end{aligned} \quad (4.68)$$

4.5 Programme zu Kapitel 4

Hier finden sie die im Kapitel benutzten Programme `anharmonic1.c`, `anharmonic2.c` und `constants.h`, `stdanho.h`.

anharmonic1.c: Es wird die Wahrscheinlichkeitsdichte $|\psi_0(q)|^2$ für den harmonischen und anharmonischen Oszillator mit dem Monte-Carlo Verfahren berechnet. Die Modellparameter sind in den header-Dateien abgelegt.

```
\tiny
/* Programm anharmonic.c */
/* MC Simulation des anharmonischen Oszillators */
/* L=MASSE/2 v^2+MU q^2+LAMBDA*q^4 */
/* Metropolis Algorithmus */
/* Berechnung des Quadrates der Grundzustandswellenfunktion */
#include <stdio.h>
#include <stdlib.h>
#include <math.h>
#include <time.h>
#include "constants.h" /* Definition von N,A,MG,MA,BIN,INTERV */
                        /* MASSE,MU,LAMBDA,DELTA */
                        /* Initialisierung von q[N],qneu */
                        /* massel, lambdal, mueleff, abg, streck, versch */
#include "stdanho.h" /* Funktion deltaS(qneu, qalt, summenn) */
                    /* MA MG-Iterationen: mcsweep(*zgr,*q) */

int main(void)
{
    unsigned int i, j;
    int *zgr, p, bin[BIN];
    zgr=&abg; srand48(time(NULL));
    /* Initialisierung des Systems */
    for (i=0; i<N; i++)
        q[i]=DELTA*(1-2*drand48());
    for (i=0; i<BIN; i++)
        bin[i]=0;
    /* Thermalisierung des Systems */
    for (i=0; i<MG; i++)
        mcsweep(zgr, q);
    /* Berechnung und Binning */
    abg=0;
    for (i=0; i<M; i++)
        { mcsweep(zgr, q); binning(bin, q); };
    /* Ausgabe der W'keitsdichte und Ablehnungsrate */
    for (i=0; i<BIN; i++)
        printf("(%i,%0.3f)", i, 20*bin[i]/(double)M);
    printf("\nabgelehnt_wurden_%.2f\n", (float)abg/(N*M*MA));
    return 0;
}
```

anharmonic2.c: Es wird die Grundzustandsenergie E_0 für den anharmonischen Oszillator mit Hilfe des Metropolis-Algorithmus und Virialsatzes (4.41) berechnet. Die Modellparameter sind in den header-Dateien abgelegt.

```

/* Programm anharmonic2.c */
/* MC Simulation des anharmonischen */
/* Oszillators mit Metropolis Algorithmus */
/* L=MASSE/2 v^2+MU q^2+LAMBDA*q^4 */
/* Berechnung der Grundzustandsenergie */
#include <stdio.h>
#include <stdlib.h>
#include <math.h>
#include <time.h>
#include "constants.h"
#include "stdanho.h"
int main(void)
{
    unsigned int i, j;
    int *zgr, p; double mittel1=0, mittel2=0;
    zgr=&abg;
    srand48(time(NULL));
    /* Initialisierung des Systems */
    for (i=0; i<N; i++)
        q[i]=DELTA*(1-2*drand48());
    /* Thermalisierung des Systems */
    for (i=0; i<MG; i++)
        mcsweep(zgr, q);
    /* Simulation und Momentenberechnung */
    abg=0;
    for (i=0; i<M; i++)
    {
        mcsweep(zgr, q);
        mittel1=mittel1+moments(2, q);
        mittel2=mittel2+moments(4, q);
    };
    /* Berechnung der Grundzustandsenergie, Wick-Test, Ausgabe */
    mittel1=mittel1/M;
    mittel2=mittel2/M;
    printf("q2=%0.4f q4=%0.4f E0=%0.4f wick=%0.4f\n",
           mittel1, mittel2,
           2*MU*mittel1+3*LAMBDA*mittel2,
           3*mittel1*mittel1-mittel2);
    printf("\nabgelehnt wurden %0.2f\n", (float) abg / (N*M*MA));
    return 0;
}

```

4.5.1 Headerdateien

Die folgenden Headerdateien werden in `anharmoini1.c` und `anharmonic2.c` eingebunden.

constants.h: Hier werden die Konstanten N , A , MG , MA , BIN , $INTERV$, $MASSE$, MU , $LAMBDA$, $DELTA$ und die Variablen $q[N]$, $qneu$, $massel$, $lambdal$, $mueff$, abg , $streck$, $versch$ definiert und teilweise initialisiert:

```

/* Programm constants.h */
/* Konstanten: N, A, MG, MA, BIN, INTERV */

```

```

/* MASSE,MU,LAMBDA,DELTA */
/* Initialisierung von q[N],qneu */
/* massel, lambdal, mueleff, abg, streck, versch */
#define N 10 /* Anzahl Gitterpunkte */
#define A 1.0 /* Gitterkonstante */
#define M 500000 /* Anzahl Iterationen */
#define MG 100 /* bis zum Gleichgewicht */
#define MA 5 /* jede MA-te Konfiguration gemessen */
#define BIN 40 /* Anzahl Bins fuer Wellenfunktion */
#define INTERV 2 /* Intervall fuer Binning [-INTERV,INTERV] */
#define MASSE 1.0
#define MU 1.0
#define LAMBDA 0.0
#define DELTA 0.5 /* Variablenaenderung = DELTA(1-2 random) */
/* Umrechnung in Gittergroessen */
double massel=MASSE/A;
double lambdal=A*LAMBDA;
double mueleff=MASSE/A+A*MU;
double qneu, q[N];
unsigned int abg=0;
double versch=(double)BIN/2.0;
double streck=0.5*(double)BIN/(double)INTERV;

```

stdanho.h: Hier werden mehrere und oft gebrauchte Funktionen für die Simulationen in der Quantenmechanik bereitgestellt:

Die erste Funktion *deltaS(double y, double x, double xs)* berechnet die Änderung der Wirkung wenn x versuchsweise in y abgeändert wird. xs ist die Summe der Variablen auf den benachbarten Gitterplätzen. Es werden die Variablen *mueleff*, *lambdal* und *massel* gebraucht.

Die zweite Funktion *mcsweep(int *zgr, double *q)* vollführt *MA* Monte-Carlo-sweeps. **q* zeigt auf den Array $q[N]$ und **zgr* auf die Variable *abg*, welche zählt, wie oft eine Änderung abgelehnt wurde. Es werden die Werte der Konstanten N , MA und $DELTA$ gebraucht.

Die dritte Funktion *binning(int *bin, double *q)* binnt die Werte von $q[N]$ im Intervall $[-INTERV, INTERV]$ im Array $bin[BIN]$. Die Variablen $q[N]$, $bin[BIN]$, *streck*, *versch* und BIN sollten definiert und initialisiert sein.

Die vierte Funktion *moments(short n, double *q)* berechnet die Summen

$$\frac{1}{N} \sum q_i^n.$$

```

/* Programm stdanho.m */
/* Aenderung der Wirkung */
double deltaS(double y, double x, double xs)
{ return (y-x)*((y+x)*(mueleff+lambdal*(y*y+x*x))-massel*xs); };
/* MA sweeps durch das Gitter */
/* Erwartet Konstanten N,MA,DELTA */
/* Argumente: Array q[N], Zeiger auf abg */

```

```

void mcsweep(int *zgr, double *q)
{ int i, j; double qneu, dS;
  for (i=0; i<MA; i++)
    for (j=0; j<N; j++)
      { qneu=q[j]+DELTA*(1-2*drand48());
        dS=deltaS(qneu, q[j], q[(j+1)%N]+q[(j+N-1)%N]);
        if (dS<0) q[j]=qneu;
          else
            if (exp(-dS)>drand48()) q[j]=qneu;
              else *zgr=*zgr+1;
        };
  }
}
/* Binning der Werte in q[N] */
void binning(int *bin, double *q)
{ int i, p;
  for (i=0; i<N; i++)
    {p=(int)(q[i]*streck+versch); if ((0<=p)&&(p<BIN)) bin[p]++;};
}
/* Berechnung der Momente */
double moments(int n, double *q)
{ int i; double sum=0;
  for (i=0; i<N; i++)
    sum=sum+pow(q[i], n);
  return sum/N;
}

```

4.6 Aufgaben

Aufgabe 8: Detailliertes Gleichgewicht

Ein statistisches System habe zwei Zustände, die mit den Wahrscheinlichkeiten p_s , $s = 1, 2$ angetroffen werden. Die p_s seien beide ungleich Null. Finden Sie die allgemeinste stochastische Matrix $W(s, s')$, die die Bedingung des detaillierten Gleichgewichts

$$P(s)W(s, s') = P(s')W(s', s) \quad \text{für } s, s' \in \{1, 2\}$$

erfüllt. Was ist die optimale Wahl für W damit W^n möglichst schnell gegen W^{eq} konvergiert.

Aufgabe 9: Markov Prozess

Betrachte ein System mit 3 Energie-Eigenzuständen mit Energien $E_1 < E_2 < E_3$. Die erlaubten Übergänge sind von $\mu \rightarrow (\mu+1) \bmod 3$. Ein derartiger Prozess kann nicht die Bedingung für das detaillierte Gleichgewicht erfüllen. Zeige, dass es trotzdem möglich ist, eine Übergangswahrscheinlichkeit $W(\mu, \nu)$ mit der Boltzmannverteilung als Gleichgewichtszustand zu konstruieren.

Kapitel 5

Reelles Skalarfeld

Skalarfeldtheorien gehören zu den einfachsten wechselwirkenden Feldtheorien und werden auch deshalb gerne bei einer Einführung in die Quantenfeldtheorie behandelt. Wichtiger als ihr pädagogische Wert ist allerdings ihr Auftreten als Bestandteil des Standardmodells der elektroschwachen Theorie. Das spinlose Higgs-Teilchen wird durch ein vierkomponentiges Skalarfeld beschrieben, das mit den Feldern der Leptonen, Baryonen und Eichbosonen wechselwirkt. Würden wir die Wechselwirkung mit den anderen Feldern abschalten, dann erhielten wir eine selbstwechselwirkende Theorie für ein vierkomponentiges Skalarfeld.

Wir wissen, dass diese Subtheorie des Standardmodells, der sogenannte *Higgs-Sektor*, für sich genommen wahrscheinlich uninteressant ist. Entfernt man nämlich den Cutoff der regularisierten ϕ^4 -Theorie in mehr als vier Dimensionen dann wird die renormierte Theorie trivial – die Wechselwirkung zwischen den skalaren Teilchen verschwindet [35]. Es gibt gute Argumente dafür, dass dies auch in vier Dimensionen geschieht. In weniger als vier Dimensionen erhält man eine wechselwirkende Theorie. Der Higgssektor ist auch dafür verantwortlich, dass die elektroschwache Eichtheorie vermutlich nur als effektive Theorie unterhalb eines cut-offs Λ sinnvoll ist¹, es sei denn sie besitzt eine nicht-Gaußschen Fixpunkt. Danach wurde im Rahmen von Gittertheorien erfolglos gesucht. Sollte das Standardmodell also – wie allgemein erwartet – „trivial“ sein, so stellt sich die Frage nach dem Wert des cutoffs Λ . Liegt dieser bei ~ 1 TeV oder etwas bei der Planckmasse? Die Antwort auf diese Frage hängt vom Wert der Masse des Higgs-Teilchens ab. Auch deshalb ist die Suche nach diesem Teilchen eine erstrangige Aufgabe der Hochenergiephysik.

Für Modelle des frühen Universums spielen Skalarfelder eine zentrale Bedeutung, da sie in vielen Untersuchungen zur Inflation, Phasenübergänge, topologischen De-

¹Es ist aber auch möglich, dass eine triviale ϕ^4 -Theorie durch Kopplung an Eichfelder nichttrivial wird.

feldern oder Strukturentstehung eine wichtige Rolle spielen. In diesem Kapitel untersuchen wir skalare (Gitter)Felder in d Dimensionen. Im Zentrum wird dabei die Behandlung von Systemen im thermischen Gleichgewicht stehen.

5.1 Quantisierung des Skalarfelds

In diesem Abschnitt untersuchen wir skalare Feldtheorien in d Dimensionen. Ich werde annehmen, dass sie mit relativistischen Feldtheorien vertraut sind. Ein reelles Skalarfeld

$$\phi : \mathbb{R}^d \longrightarrow \mathbb{R}, \quad x = (x^\mu) = (ct, \mathbf{x}) \in \mathbb{R}^d, \quad (5.1)$$

erfüllt eine kovariante Feldgleichung und diese sei die *Euler-Lagrange Gleichung* zu einer klassischen invarianten Wirkung $S = \int d^d x \mathcal{L}(\phi, \partial_\mu \phi)$,

$$\frac{\delta S}{\delta \phi} = 0 \implies \partial_\mu \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \partial_\mu \phi(x)} - \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \phi(x)}. \quad (5.2)$$

Insbesondere erfüllt das freie Feld die *Klein-Gordon Gleichung* $(\square + m^2)\phi = 0$. Ein einfacher heuristischer Übergang von der Quantenmechanik zur Quantenfeldtheorie geht über die Ersetzung

$$q_i(t) \equiv q(t, i) \longrightarrow \phi(t, \mathbf{x}) = \phi(x), \quad \sum_i \longrightarrow \int d^{d-1}x. \quad (5.3)$$

Formal können wir viele Resultate der Quantenmechanik übernehmen, wenn wir diese Ersetzungen vornehmen. So hat zum Beispiel die Vakuum-Erwartungswerte zeitgeordneter Produkte von Feldoperatoren folgende Funktionalintegral-Darstellung,

$$\langle 0 | T \hat{\phi}(x_1) \cdots \hat{\phi}(x_n) | 0 \rangle = \frac{1}{Z} \int \mathcal{D}\phi \phi(x_1) \cdots \phi(x_n) e^{iS[\phi]/\hbar}, \quad (5.4)$$

wobei S die klassische Wirkung des Skalarfeldes ist. Hier ist $\mathcal{D}\phi$ die Verallgemeinerung des Integrals über alle Wege. Man integriert über alle Funktionen $\phi : \mathbb{R}^d \rightarrow \mathbb{R}$. Die eindimensionale Quantenmechanik ist eine eindimensionale Feldtheorie, bei der man über Funktionen $q : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$, also über Wege, integriert. Der Normierungsfaktor Z ist die Vakuum-Vakuum Amplitude,

$$Z = \int \mathcal{D}\phi e^{iS[\phi]/\hbar}.$$

Ähnlich wie in der Quantenmechanik zu imaginären Zeiten oder in der Quantenstatistik führt man die euklidischen Feldoperatoren ein,

$$\hat{\phi}_E(x) \equiv \hat{\phi}_E(\tau, \mathbf{x}) = e^{\tau \hat{H}} \hat{\phi}(0, \mathbf{x}) e^{-\tau \hat{H}}, \quad x = (\tau, \mathbf{x}) = (-ix^0, \mathbf{x}), \quad (5.5)$$

und beweist formal, dass die thermischen Erwartungswerte von zeitgeordneten Produkten dieser operatorwertigen Distribution folgende Funktionalintegral-Darstellung besitzen

$$\begin{aligned} \langle T \hat{\phi}_E(x_1) \cdots \hat{\phi}_E(x_n) \rangle_\beta &= \frac{1}{Z(\beta)} \text{tr} e^{-\beta \hat{H}} T \hat{\phi}_E(x_1) \cdots \hat{\phi}_E(x_n) \\ &= \frac{1}{Z(\beta)} \int \mathcal{D}\phi \phi(x_1) \cdots \phi(x_n) e^{-S_E[\phi]/\hbar} \end{aligned} \quad (5.6)$$

wobei $\beta = 1/k_B T$ ist. Es wird über alle β -periodischen Funktionen

$$\phi : [0, \beta] \times \mathbb{R}^{d-1} \longrightarrow \mathbb{R}, \quad \phi(\tau + \beta, \mathbf{x}) = \phi(\tau, \mathbf{x}), \quad (5.7)$$

funktional integriert. Hier tritt die euklidische Wirkung S_E auf. Der Normierungsfaktor in (5.6) ist die *Zustandssumme*

$$Z(\beta) = e^{-\beta F} = \int \mathcal{D}\phi e^{-S_E[\phi]/\hbar}. \quad (5.8)$$

Ein Hauptanliegen der Quantenfeldtheorie bei endlichen Temperaturen ist die Berechnung der *freien Energiedichte* $f = F/V$.

Strebt die Temperatur gegen Null oder β gegen ∞ , dann erhalten wir die in ihren Argumenten symmetrischen *Schwinger-Funktionen*,

$$\begin{aligned} S^{(n)}(x_1, \dots, x_n) &= \langle 0 | T \hat{\phi}_E(x_1) \cdots \hat{\phi}_E(x_n) | 0 \rangle \\ &= \frac{1}{Z} \int \mathcal{D}\phi \phi(x_1) \cdots \phi(x_n) e^{-S_E[\phi]/\hbar}. \end{aligned} \quad (5.9)$$

Diese sind invariant unter euklidischen Lorentz-Transformationen, ändern also nicht bei $SO(d)$ -Drehungen der Argumente x_i . Unter teilweise natürlichen Annahmen an die Schwingerfunktionen kann man aus ihnen die vollständige Quantentheorie im Minkowski-Raum rekonstruieren. Die Vakuumerwartungswerte von Produkten von Feldoperatoren in der relativistischen Theorie, die sogenannten *Wightman-Funktionen* $W^{(n)}$, sind Randwerte der *analytischen* Wightman-Funktionen für komplexe Zeiten und die $S^{(n)}$ sind die Wightman-Funktionen zu imaginären Zeiten. Im folgenden werden wir den Index E unterdrücken, da wir ausschließlich euklidische Theorien unter-

suchen werden.

Die thermischen Erwartungswerte von zeitgeordneten Produkten des euklidischen Feldes (5.6) werden vom Funktional

$$Z[\beta, j] = \int \mathcal{D}\phi e^{-S_E[\phi]/\hbar + \int j(x)\phi(x)} = \exp(W[\beta, j]), \quad (5.10)$$

der Zustandssumme in Anwesenheit einer äusseren Quelle $j(x)$, generiert

$$\langle T\hat{\phi}_E(x_1) \dots \phi_E(x_n) \rangle_\beta = \frac{1}{Z[\beta, 0]} \frac{\delta^n Z[\beta, j]}{\delta j(x_1) \dots \delta j(x_n)} \Big|_{j=0}, \quad (5.11)$$

während die verbindenden Korrelationsfunktionen von $W = \log Z$ erzeugt werden,

$$\langle T\hat{\phi}_E(x_1) \dots \phi_E(x_n) \rangle_{c,\beta} = \frac{\delta^n W[\beta, j]}{\delta j(x_1) \dots \delta j(x_n)} \Big|_{j=0}, \quad Z[\beta, j] = e^{W[\beta, j]}. \quad (5.12)$$

Das Funktional $W[\beta, j]$ spielt die Rolle einer freien Energie bei Anwesenheit einer Quelle. Für tiefe Temperaturen geht es in das *Schwingerfunktional* $W[j]$ über, das die verbundenen Vakuumerwartungswerte erzeugt,

$$\langle 0|T\hat{\phi}_E(x_1) \dots \phi_E(x_n)|0 \rangle_c = \frac{\delta^n W[j]}{\delta j(x_1) \dots \delta j(x_n)} \Big|_{j=0}, \quad W[j] = \lim_{\beta \rightarrow \infty} W[\beta, j]. \quad (5.13)$$

Die euklidische Wirkung des freien Skalarfeld

$$S_0(\phi) = \frac{1}{2} \int d^d x (\nabla\phi \cdot \nabla\phi + m^2\phi^2) = \frac{1}{2} \int d^d x \phi (-\Delta + m^2) \phi \quad (5.14)$$

ist eine quadratische Funktion und das Funktionalintegral (5.10) für $Z[\beta, j]$ wird zu einem berechenbaren Gaußschen Integral mit der Lösung

$$\begin{aligned} Z[\beta, j] &= \frac{\text{const}}{\det^{1/2}(-\Delta + m^2)} \exp(W[\beta, j]) \quad \text{mit} \\ W[\beta, j] &= \int d^d x d^d y j(x) \Delta_F(\beta; x-y) j(y), \end{aligned} \quad (5.15)$$

wobei der euklidische *Feynman-Propagator* im Ortsraum auftritt,

$$\Delta_F(\beta; x-y) = \langle T\hat{\phi}_E(x)\hat{\phi}_E(y) \rangle_\beta = \langle x | \frac{1}{-\Delta + m^2} | y \rangle. \quad (5.16)$$

Berücksichtigt die Periodizitätsbedingung (5.7) für die Felder, dann findet man fol-

gende Fourierdarstellung für diesen Propagator bei endlichen Temperaturen

$$\Delta_F(\beta; x) = \frac{1}{\beta} \sum_n \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} \frac{e^{-i\omega_n x^0 - i\mathbf{k}x}}{\omega_n^2 + \mathbf{k}^2 + m^2}, \quad \omega_n = \frac{2\pi}{\beta}n. \quad (5.17)$$

Für tiefe Temperaturen liegen die *Matsubara-Frequenzen* ω_n sehr dicht und die Riemannsche Summe geht in ein Riemannsches Integral über. Deshalb strebt $\Delta_F(\beta; x)$ für $T \rightarrow 0$ gegen den bekannten euklidischen Feynmanpropagator bei Temperatur Null,

$$\Delta_F(x) = \lim_{\beta \rightarrow \infty} \Delta_F(\beta; x) = \int \frac{d^4k}{(2\pi)^4} \frac{e^{-ikx}}{k^2 + m^2}. \quad (5.18)$$

Die Addition eines Potentialterms zur freien Wirkung S_0 in (5.14) führt auf die euklidische Wirkung des selbst-wechselwirkenden Skalarfeldes,

$$S_E = S_0 + \int d^d x V(\phi). \quad (5.19)$$

Entwickelt man nun die Funktionalintegrale (5.6) oder (5.9) in Potenzen der Wechselwirkung V , dann erhält man die mit Divergenzen behaftete Störungsentwicklungen für die Schwingerfunktionen bei endlicher Temperatur oder bei Temperatur Null. Den dabei auftretenden Amplituden können Feynmangraphen mit entsprechenden Regeln zur Berechnung der Amplituden zugeordnet werden. Zum Beispiel wird jeder inneren Linie eines Graphen der Feynmanpropagator Δ_F zugeordnet und die möglichen Vertizes des Graphen werden durch die Selbstwechselwirkung V bestimmt.

5.1.1 Das freie Feld bei endlichen Temperaturen

Für das freie Feld mit euklidischer Wirkung

$$S_0(\phi) = \frac{1}{2}(\phi, A\phi), \quad A = -\Delta + m^2, \quad (5.20)$$

wobei (\cdot, \cdot) das L_2 -Skalarprodukt bezeichnet, führt das Funktionalintegral für die Zustandssumme (5.8) auf die Determinante des Operators A , und entsprechend ist

$$F(\beta) = \frac{1}{2\beta} \log \det A + \text{const.} \quad (5.21)$$

Der Operator wirkt auf β -periodische Funktionen und diese Randbedingung an die Moden führt auf eine Temperaturabhängigkeit der A -Eigenwerte und damit der frei-

en Energie.

Determinanten von Differentialoperatoren treten in vielen feldtheoretischen Untersuchungen auf, zum Beispiel bei der semiklassischen Näherung. Es lohnt sich daher, diese Determinanten näher zu betrachten. Wir schließen das System in eine endliche Box ein, damit der nicht-negative Operator A ein diskretes Spektrum hat. Die zu A gehörige ζ -Funktion ist durch die Reihe

$$\zeta_A(s) = \sum_n \lambda_n^{-s}, \quad (5.22)$$

definiert und diese konvergiert für genügend große $\Re(s)$. Die Reihe definiert die ζ -Funktion in einer Halbebene der komplexen s -Ebene. Über die analytische Fortsetzung gewinnt man die Funktion in der gesamten komplexen Ebene [55].

Zum Beispiel konvergiert die Reihe (5.22) für den einfachen Operator in (5.20) für alle s mit $\Re(s) > d/2$ und definiert eine meromorphe Funktion in der komplexen s -Ebene die in einer Umgebung von 0 sogar analytisch ist. Die für Matrizen gültige Identität

$$\log \det A = \text{Sp} \log A = \sum \log \lambda_n = -\left. \frac{\zeta_A(s)}{ds} \right|_{s=0} \quad (5.23)$$

wird nun für Operatoren übernommen, und dies definiert die ζ -Funktion-Regularisierung der Funktionaldeterminante. Indem man den Realteil des Arguments s von ζ_A genügend groß wählt, wird die Determinante regularisiert. Die Fortsetzung der Funktion nach $s = 0$ entspricht einer speziellen Renormierung. Der Zusammenhang zu anderen 1-Schleifen Renormierungsschemen ist bekannt [56].

Mit Hilfe der *Mellin-Transformation* kann man die ζ -Funktion mit dem Wärmeleitungskern von A in Verbindung bringen,

$$\zeta_A(s) = \sum_n \frac{1}{\Gamma(s)} \int_0^\infty dt t^{s-1} e^{-t\lambda_n} = \frac{1}{\Gamma(s)} \int_0^\infty dt t^{s-1} \text{Sp} (e^{-tA}). \quad (5.24)$$

Bezeichnet $K(t; x, y)$ der Integralkern des Operators $\exp(-tA)$, dann ist

$$\text{Sp} (e^{-tA}) = \int dx K(t; x, x), \quad t > 0, \quad (5.25)$$

und die ζ -Funktionen hat die Darstellung

$$\zeta_A(s) = \frac{1}{\Gamma(s)} \int_0^\infty dt t^{s-1} \int dx K(t; x, x). \quad (5.26)$$

In Anwendungen ist A ein Differential-Operator A_x in der Ortsdarstellung und der Wärmeleitungskern K erfüllt die Differentialgleichung

$$\frac{\partial}{\partial t} K(t; x, y) = -A_x K(t; x, y) \quad \text{und} \quad \lim_{t \rightarrow 0} K(t; x, y) = \delta(x - y). \quad (5.27)$$

Damit können wir die Determinante von A scheinbar wie folgt berechnen: wir konstruieren die eindeutige Lösung des Anfangswertproblems (5.27), setzen die Lösung $K(t, x, y)$ in die Darstellung (5.24, 5.25) für die ζ -Funktion ein und berechnen dann die Determinante mit Hilfe der Formel (5.23). Diese Vorgehensweise hat mindestens zwei Probleme. Für viele Operatoren von Interesse kann man K nicht explizit berechnen und zudem existiert die Integraldarstellung (5.26) nur für genügend große $\Re(s)$. Es braucht noch die analytische Fortsetzung der ζ -Funktion nach $s = 0$. Allerdings genügt uns die Ableitung der ζ -Funktion am Ursprung, und im Gegensatz zur Funktion selbst ist diese Größe in vielen Fällen berechenbar. Für interessante Anwendungen dieser Renormierungs Methode auf Probleme der Quantenfeldtheorie verweise ich auf [55, 57].

Für den Operator $A = -\Delta + m^2$ hat der Wärmekern die Form

$$K(t; x, x') = \frac{e^{-m^2 t}}{(4\pi t)^{d/2}} \sum_{n \in \mathbb{Z}} e^{-\{(\tau - \tau' + n\beta)^2 + (\mathbf{x} - \mathbf{x}')^2\}/4t} \quad (5.28)$$

Der $n = 0$ Term ist der Wärmekern zum Schrödinger-Operator des freien Teilchens in \mathbb{R}^d und die Summe macht daraus den Wärmekern auf dem Zylinder $[0, \beta] \times \mathbb{R}^{d-1}$. Wir finden

$$\zeta_A(s) = \frac{\beta V}{(4\pi)^{d/2} \Gamma(s)} \int dt t^{s-1-d/2} e^{-m^2 t} \sum_{n=-\infty}^{\infty} e^{-n^2 \beta^2 / 4t}. \quad (5.29)$$

Das Spektrum von $-\Delta + m^2$ auf $S^1 \times \mathbb{R}^{d-1}$ ist nicht diskret und dies zeigt sich in der harmlosen Volumendivergenz der Zetafunktion. Beim Übergang zur freien Energiedichte werden wir diesen divergenten Faktor los. Wir könnten auch periodische Randbedingungen in allen Raumrichtungen fordern und am Schluss der Rechnung den Limes $L \rightarrow \infty$ durchführen. Dieses Vorgehen führt für die freie Theorie zu identischen Resultaten.

Mit Hilfe folgender Integraldarstellung für die Kelvin-Funktionen

$$\int_0^\infty dt t^a e^{-bt - c/t} = 2 \left(\frac{c}{b}\right)^{(a+1)/2} K_{a+1} \left(2\sqrt{bc}\right) \quad (5.30)$$

können die t -Integrale berechnet werden und führen auf die Reihendarstellung

$$\zeta_A(s) = \frac{\beta V}{(4\pi)^{d/2}} \frac{m^{d-2s}}{\Gamma(s)} \left(\Gamma(s - \frac{d}{2}) + 4 \sum_1^\infty \left(\frac{nm\beta}{2} \right)^{s-d/2} K_{d/2-s}(nm\beta) \right). \quad (5.31)$$

Die Gammafunktion hat einfache Pole an den Stellen $0, -1, -2, \dots$, und $1/\Gamma(s) \sim s$. In unserer Welt mit 4 Raumzeit-Dimensionen benutzt man

$$\frac{\Gamma(s-2)}{\Gamma(s)} = \frac{1}{(s-1)(s-2)} \quad \text{und} \quad \frac{1}{\Gamma(s)} = s + O(s^2)$$

um die Ableitung der Zetafunktion am Ursprung zu berechnen. Man findet für die freie Energiedichte

$$f(\beta) = -\frac{1}{2\beta V} \zeta'_A(0) = -\frac{m^4}{128\pi^2} \left(3 - 2 \log m^2 + 64 \sum_{n=1,2,\dots} \frac{K_2(nm\beta)}{(nm\beta)^2} \right). \quad (5.32)$$

Um das Resultat für masselose Teilchen zu gewinnen benutzen wir $K_2(x) \sim 2/x^2$, so dass

$$\lim_{m \rightarrow 0} f(\beta) = -\frac{T^4}{\pi^2} \zeta_R(4), \quad (5.33)$$

wobei die in der Zahlentheorie so wichtige *Riemannsche Zetafunktion* auftritt,

$$\zeta_R(x) = \sum_{n \in \mathbb{N}} n^{-x}. \quad (5.34)$$

Die weiter unten benötigten Werte dieser Funktion und ihrer Ableitung sind

$$\xi_R(0) = -\frac{1}{2}, \quad \xi_R(2) = \frac{\pi^2}{6}, \quad \xi_R(4) = \frac{\pi^4}{90} \quad \text{und} \quad \zeta'_R(0) = -\frac{1}{2} \log(2\pi). \quad (5.35)$$

Sie ist in der ganzen komplexen Ebene regulär, bis auf einen einfachen Pol mit Residuum 1 bei $s = 1$. Damit lautet die freie Energiedichte und innere Energiedichte für masselose spinlose Teilchen

$$f(\beta) = -\frac{\pi^2 T^4}{90} \quad \text{und} \quad u(\beta) = \partial_\beta(\beta f) = \frac{\pi^2 T^4}{30}. \quad (5.36)$$

Für Photonen mit zwei Polarisation sind die Energiedichten der Hohlraumstrahlung doppelt so groß.

Um die freien Energie für ein freies Gas von massiven spinlosen Teilchen zu be-

rechnen, entwickeln wir die Besselfunktion für kleine Argumente,

$$K_{2-s}(x) \sim \frac{2}{x^2} + \frac{1}{8} \left(\frac{3}{4} - \gamma - \log \frac{x}{2} \right) + O(x^4) \quad (5.37)$$

und benutzen die Formel

$$\sum \log(nm\beta) = \log(m\beta)\zeta_R(0) - \zeta'_R(0) \quad (5.38)$$

für die mit Hilfe der ζ -Funktionsregularisierung definierte Summe der Logarithmen. Dies führt auf folgende Entwicklung der Energiedichte für hohe Temperaturen $T \gg m$,

$$f(\beta) = -\frac{1}{128\pi^2} \left(128\zeta_R(4) T^4 - 32\zeta_R(2) m^2 T^2 - 8m^4 \zeta_R(0) \log \frac{m}{2T} + \{3 + 8\zeta'_R(0) + (6 - 8\gamma)\zeta_R(0) - 2 \log m^2\} m^4 \right) + O\left(\frac{m^2}{T^2}\right), \quad (5.39)$$

mit Euler-Konstanten $\gamma \approx 0,5772$. Die Werte für die Riemannsche ζ -Funktion sind in (5.35) angegeben.

5.2 Schwingerfunktion und effektives Potential

Effektive Potentiale sind nützlich bei der Untersuchung der Phasen und Phasenübergänge von Systemen mit Ordnungsparameter. In der Feldtheorie ist das effektive Potential die Legendre-Transformierte der Schwinger-Funktion bei Anwesenheit einer homogenen Quelle, in der statistischen Mechanik ist es die freie Energie bei festem Ordnungsparameter. Es gibt allerdings Alternativen zu diesem konventionellen effektiven Potential. Dazu gehört das „constraint effective potential“, das später in der Vorlesung vorgestellt wird.

In Anwesenheit einer homogenen äusseren Quelle j hat die „Zustandssumme“ die formale Pfadintegral-Darstellung [24]

$$Z(\beta, j) \equiv e^{\beta V w(\beta, j)} = c \cdot \oint \mathcal{D}\phi \exp \left(-S_E[\phi] + j \int_0^\beta \phi(x) \right), \quad (5.40)$$

wobei in der Quantenstatistik über β -periodische Funktionen integriert wird,

$$\phi(\tau + \beta, \mathbf{x}) = \phi(\tau, \mathbf{x}), \quad \beta = \frac{1}{T}, \quad (5.41)$$

und V das *räumliche Volumen* bezeichnet. Bis auf den Volumenfaktor βV ist die *Schwingerfunktion* $w(\beta, j)$ in (5.40) gleich dem Schwingerfunktional W in (5.10) für eine konstante Quelle. Eine konstante Quelle ist verträglich mit der Translationsinvarianz des Systems. Die Funktion $-w(\beta, j)$ ist gleich der freien Energiedichte für das System mit Hamiltonoperator $\hat{H}_j = \hat{H} - j\hat{\phi}$ und strebt für tiefe Temperaturen gegen die negative Grundzustandsenergiedichte $-E_0(j)/V$ des Systems mit Hamiltonian \hat{H}_j .

Aus w kann man leicht den quantentheoretischen Mittelwert des Feldes berechnen,

$$\frac{dw}{dj} = \frac{\int \mathcal{D}\phi M e^{-S[\phi]+j\int\phi}}{\int \mathcal{D}\phi e^{-S[\phi]+j\int\phi}} = \langle \phi(x) \rangle_j. \quad (5.42)$$

Wir haben hier benutzt, dass für translationsinvariante Systeme der Erwartungswert von $\phi(x)$ unabhängig von x ist, so dass gilt

$$\langle \phi(x) \rangle = \langle M \rangle, \quad \text{wobei} \quad M = \frac{1}{\beta V} \int \phi(x) \quad (5.43)$$

den raum-zeitliche Mittelwert von $\phi(x)$ bezeichnet. Man beachte, dass Erwartungswerte von der äusseren Quelle j abhängen, da sie mit der Wirkung $S[\phi] - j\int\phi(x)$ berechnet werden. An Stellen wo w nicht differenzierbar ist, kann man die Formel (5.42) nicht direkt anwenden. Die Schwingerfunktion $w(\beta, j)$ ist strikt konvex, da ihre zweite Ableitung gleich dem Erwartungswert einer positiven Grösse ist,

$$\frac{d^2w}{dj^2} = \langle (M - \langle M \rangle)^2 \rangle. \quad (5.44)$$

Das *effektive Potential* gewinnt man mit Hilfe einer *Legendre-Transformation* aus der Schwingerfunktion,

$$u(\beta, \varphi) = (\mathcal{L}w)(\varphi) = \sup_j (j\varphi - w(\beta, j)). \quad (5.45)$$

Die maximierende Quelle j heisst zu φ konjugiert. Im Gegensatz zum mikroskopischen Feld ϕ ist φ ein makroskopisches mittleres Feld. Ist das Minimum φ_0 von u nicht entartet, dann ist es gleich dem Erwartungswert des Feldoperators im Gleichgewichtszustand,

$$u(\beta, \varphi_0) \leq u(\beta, \varphi), \quad \forall \varphi \iff \varphi_0 = \langle \phi(x) \rangle_{j=0}. \quad (5.46)$$

Dies folgt aus der ersten Ungleichung (5.55) im Abschnitt 5.2.1 über Legendre Trans-

formationen.

Es gibt mehrere Verallgemeinerungen der gerade betrachteten Systeme. Ist man an der Vakuumstruktur einer euklidischen Skalarfeldtheorie mit Lagrangedichte

$$\mathcal{L}(\phi(x)) = \int_{\Omega} d^d x \left\{ \frac{1}{2} \nabla \phi(x) \nabla \phi(x) + V(\phi(x)) \right\}, \quad (5.47)$$

interessiert, dann braucht das Quantisierungsgebiet Ω weder ein Zylinder oder der ganze Raum \mathbb{R}^d zu sein und es werden allgemeinere Gebiete $\Omega \subset \mathbb{R}^d$ bei der Funktionalintegral-Quantisierung betrachtet. Auch kann das ϕ -Feld mehrere Komponenten aufweisen und nicht-trivial unter einer globalen inneren Symmetriegruppe G transformieren. Das Feld kann auch Werte in einer Lieschen Gruppe oder einem homogenen Raum annehmen.

Der „klassische Grundzustand“ entspricht dem *homogenen* Feld, welches das klassische Potential V minimiert. Dieser Wert ist nicht notwendigerweise gleich dem quantenmechanischen Erwartungswert $\langle \hat{\phi}(x) \rangle$ des Quantenfeldes. Um die Quantenkorrekturen zum klassischen Vakuum zu studieren setzt man die Schwingerfunktion w ein,

$$Z(\Omega, j) = \int \mathcal{D}\phi \exp \left(-S[\phi] + j \int_{\Omega} \phi(x) \right) = e^{\Omega w(\Omega, j)}. \quad (5.48)$$

Wir benutzen das gleiche Symbol Ω für das Quantisierungsgebiet und sein Volumen. Hat das Gebiet Ω einen Rand $\partial\Omega$, dann wird das Feld noch gewisse Randbedingungen erfüllen. Auf derlei Fragen soll hier nicht weiter eingegangen werden. Auch für Feldtheorien in allgemeineren Quantisierungsgebieten definiert man das effektive Potential $u(\Omega, \varphi)$ genauso wie in (5.45) als Legendre-Transformierte der Schwingerfunktion. Wählen wir als Raumzeit einen Kasten mit Volumen βV und fordern periodische Randbedingungen, dann ist $Z(\Omega, j)$ die thermische Zustandssumme in Anwesenheit der Quelle j (5.40) und $u(\Omega, \varphi)$ das effektive Potential bei endlichen Temperaturen.

5.2.1 Die Legendre-Transformation

Die Legendre-Transformation tritt in der Mechanik, Thermodynamik, Quantenstatistik und Quantenfeldtheorie auf und wir wollen hier ihre wichtigsten Eigenschaften notieren. Im Folgenden seien φ und j Elemente einer konvexen Menge im \mathbb{R}^d .

1. Die Legendre-Transformierte einer für genügend große Argumente konvexen Funktion ist immer konvex.

Zum Beweis betrachten das zwischen φ_1 und φ_2 interpolierende Feld

$$\varphi_\alpha = (1 - \alpha)\varphi_1 + \alpha\varphi_2, \quad 0 \leq \alpha \leq 1. \quad (5.49)$$

Es gilt die Abschätzung

$$\begin{aligned} u(\varphi_\alpha) &= \sup_j \left\{ (1 - \alpha)(j, \varphi_1) + \alpha(j, \varphi_2) - ((1 - \alpha) + \alpha)w(j) \right\} \\ &\leq (1 - \alpha) \sup_j \left\{ (j, \varphi_1) - w(j) \right\} + \alpha \sup_j \left\{ (j, \varphi_2) - w(j) \right\} \\ &= (1 - \alpha)u(\varphi_1) + \alpha u(\varphi_2), \end{aligned} \quad (5.50)$$

wobei wir benutzen, dass das Supremum einer Summe kleiner oder gleich der Summe der Suprema der Summanden ist. Damit liegt der Graph von u unterhalb der die Punkte $(\varphi_i, u(\varphi_i))$ verbindenden Strecke. Dies beweist die Konvexität von u .

2. Die Legendre-Transformation ist involutiv für konvexe Funktionen.

Für ein konvexes w gibt es für jeden Punkt $(j_0, w(j_0))$ eine Hyperebene unterhalb des Graphen von w . In anderen Worten, es gibt ein von j_0 abhängiges φ_0 , so dass

$$w(j_0) + (\varphi_0, j - j_0) \leq w(j) \quad \text{für alle } j,$$

oder auch

$$(\varphi_0, j) - w(j) \leq (\varphi_0, j_0) - w(j_0) \quad \text{für alle } j.$$

Das Supremum der linken Seite bezüglich j ist $\mathcal{L}w$ an der Stelle φ_0 , so dass gilt

$$(\mathcal{L}w)(\varphi_0) \leq (\varphi_0, j_0) - w(j_0). \quad (5.51)$$

Schreiben wir dies in der Form

$$w(j_0) \leq (\varphi_0, j_0) - (\mathcal{L}w)(\varphi_0). \quad (5.52)$$

und bemerken, dass die rechte Seite kleiner gleich der Legendre-Transformierten von $\mathcal{L}w$ ist, dann folgt $w(j_0) \leq (\mathcal{L}^2 w)(j_0)$. Deshalb ist die zweifache Legendre-Transformierte immer größer oder gleich der ursprünglichen Funktion. Andererseits gilt

$$(\mathcal{L}w)(\varphi) \geq (\varphi, j) - w(j) \quad \text{für alle } \varphi \implies w(j) \geq (\varphi, j) - (\mathcal{L}w)(\varphi). \quad (5.53)$$

Nehmen wir das Supremum über alle φ in der letzten Ungleichung, dann folgt $w(j) \geq (\mathcal{L}^2 w)(j)$, oder dass die zweifache Legendre-Transformierte immer kleiner oder gleich

der ursprünglichen Funktion ist. Zusammen mit der obigen Ungleichung folgern wir, dass für jede konvexe Funktion gilt

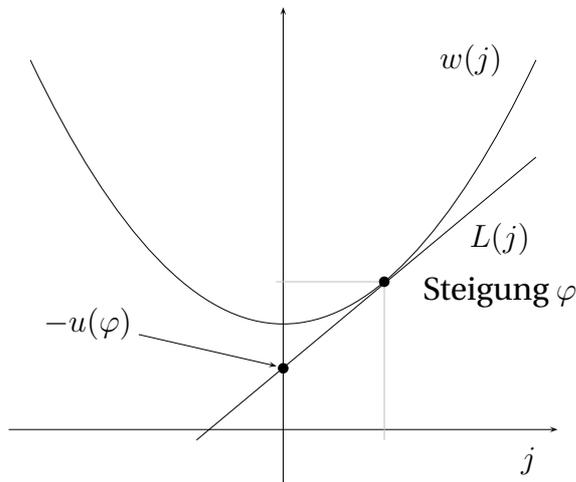
$$(\mathcal{L}^2 w)(j) = w(j). \tag{5.54}$$

3. Für beliebige φ und j gilt die Ungleichung von FENCHEL und YOUNG

$$w(j) + u(\varphi) \geq (j, \varphi), \quad u = \mathcal{L}w. \tag{5.55}$$

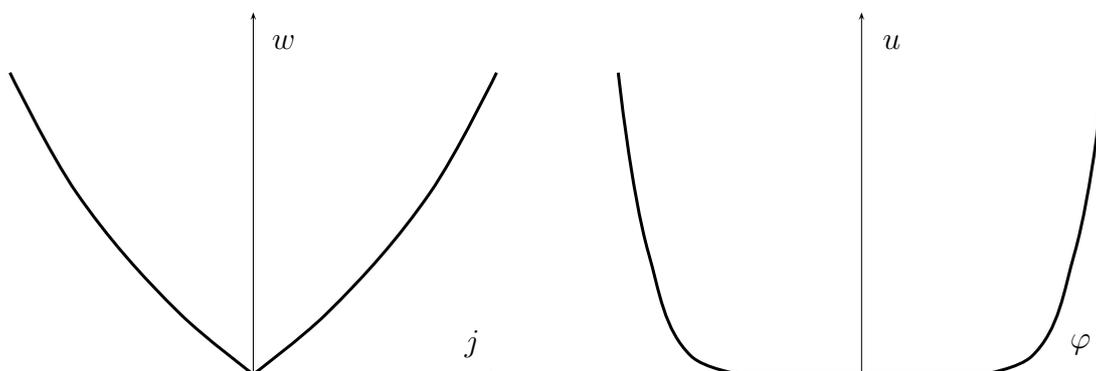
Sie wird zu einer Gleichung für konjugierte Variablen φ und j . Diese Eigenschaft folgt unmittelbar aus der Ungleichung (5.53).

4. Ist die stetige Schwingerfunktion nicht differenzierbar und hat einen Knick, dann hat $u = \mathcal{L}w$ ein Plateau. Für ein einkomponentiges Feld ist die Breite des Plateau gleich dem Sprung von w' . Umgekehrt wird ein Plateau in einen Knick abgebildet.



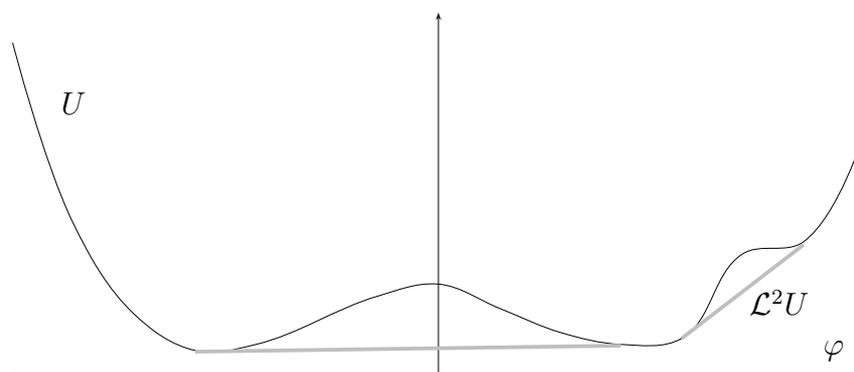
Diese Eigenschaft folgt aus der graphischen Konstruktion der Transformation: $u(\varphi)$ ist $-L(0)$, wobei der Graph der linearen Funktion $L(j)$ mit Steigung φ denjenigen von $w(j)$ berührt. Für gegebenes φ und eine konvexe und differenzierbare Schwingerfunktion ist der konjugierte Strom durch die Forderung definiert, dass $L(j)$ beim konjugierten Strom tangential an $w(j)$ ist.

folgenden Abbildung ist eine typische Situation für ein System mit spontaner Symmetriebrechung skizziert. Die Schwingerfunktion hat einen Knick bei ausgeschalteter Quelle und entsprechend das effektive Potential u ein Plateau.



5. Die zweifache Legendre-Transformierte einer für große Argumente konvexe Funktion die konvexe Hülle dieser Funktion ist.

Dies folgt sofort aus dem bisher gezeigten Eigenschaften.



6. Für differenzierbare w und u sind die konjugierten Variablen φ und j wie folgt verbunden,

$$\varphi = w'(j) \quad \text{und} \quad j = u'(\varphi). \quad (5.56)$$

Ersetzen wir (j, φ) durch (p, \dot{x}) und (w, u) durch (H, L) , dann ist dies die bekannte Legendre-Transformation der klassischen Mechanik von der Hamiltonschen zur Lagrangeschen Formulierung.

7. Ist u die Legendre-Transformierte von w , dann ist u_α die Legendre-Transformierte von w_α . Dabei ist $F_\alpha(x)$ die reskalierte Funktion

$$F_\alpha(x) = \alpha F\left(\frac{x}{\alpha^{1/2}}\right). \quad (5.57)$$

Die Legendre-Transformierte des Monoms mit Exponenten $\alpha > 1$ ist das Monom mit dualem Exponent β ,

$$w(j) = \frac{1}{\alpha} |j|^\alpha \iff u(\varphi) = \frac{1}{\beta} |\varphi|^\beta, \quad \text{mit} \quad \frac{1}{\alpha} + \frac{1}{\beta} = 1. \quad (5.58)$$

Mit zunehmendem Exponent β entwickelt u ein Plateau von -1 bis 1 . Der Exponent α der transformierten Funktion w strebt gegen Eins und die Funktion konvergiert gegen die stückweise lineare Funktion $w(j) = |j|$.

8. Sind $w''(j)$ und $u''(\varphi)$ die Matrizen der zweiten Ableitungen von w und u , dann gilt

$$w''(j) u''(\varphi) = \mathbb{1}, \quad (j, \varphi) \text{ dual.} \quad (5.59)$$

Diese Eigenschaft folgt unmittelbar aus den Relationen

$$\frac{\partial^2 w}{\partial j_r \partial j_s} = \frac{\partial \varphi_r}{\partial j_s} \quad \text{und} \quad \frac{\partial^2 u}{\partial \varphi_r \partial \varphi_s} = \frac{\partial j_r}{\partial \varphi_s}.$$

9. Als weitere Eigenschaften notieren wir:

Verhalten unter *Translationen*:

$$\begin{aligned} w(j) = w_1(j) + b &\Rightarrow (\mathcal{L}w)(\varphi) = (\mathcal{L}w_1)(\varphi) - b \\ w(j) = w_1(j + k) &\Rightarrow (\mathcal{L}w)(\varphi) = (\mathcal{L}w_1)(\varphi) - \varphi \cdot k \end{aligned} \quad (5.60)$$

Verhalten unter *Inversion*:

$$w(j) = w_1^{-1}(j) \Rightarrow (\mathcal{L}w)(\varphi) = -\varphi \cdot (\mathcal{L}w_1) \left(\frac{1}{\varphi} \right). \quad (5.61)$$

Nach dieser Erinnerung an wesentliche Eigenschaften der Legendre-Transformation kehren wir zur Quantenfeldtheorie zurück.

5.3 Skalares Gitterfeld

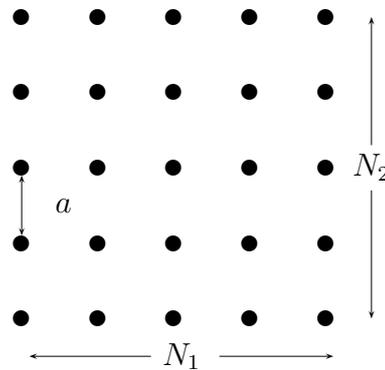
Bei der Gitterregularisierung der Funktionalintegrale wird die euklidische Raumzeit \mathbb{R}^d durch ein d -dimensionales Gitter Λ ersetzt. Für ein endliches Λ geht das formale Funktionalintegral (5.6) in ein gewöhnliches endlich-dimensionales Integral über, dass mit den Methoden der statistischen Mechanik behandelt werden kann.

Das Gitter wird aus theoretischen und praktischen Gründen zunächst als endlich angenommen. Der Einfachheit halber betrachten wir meistens ein *einfach kubisches*

Gitter. Die Gitterpunkte $x = (x^1, \dots, x^d)$ sind Elemente eines d -dimensionalen Gitters Λ ,

$$x^\mu = na \quad \text{mit} \quad n = 1, \dots, N_\mu, \quad L_\mu = aN_\mu. \tag{5.62}$$

Bei periodischen Randbedingungen werden die Gitterpunkte $x = (x^1, \dots, x^\mu, \dots, x^d)$ und $x' = (x^1, \dots, x^\mu + L_\mu, \dots, x^d)$ identifiziert und das Gitter wird zu einem (diskretisierten) Torus,



Ein Gitterfeld ϕ definiert eine Abbildung von Λ in den Targetraum,

$$\Lambda \ni x \longrightarrow \phi_x \in \mathcal{T}. \tag{5.63}$$

Im einfachsten Fall ist der Targetraum $\mathcal{T} = \mathbb{R}$, im Standardmodell der elektroschwachen Wechselwirkung ist $\phi \in \mathbb{C}^2$. Für Sigma-Modelle ist der Targetraum eine Lie-Gruppe oder ein homogener Raum und für isingartige Spinmodelle ist er eine endliche Gruppe.

Als Randbedingung wird dann meistens eine der folgenden Bedingungen aufgelegt:

- *Periodische Randbedingungen:* Mit die Randbedingungen $\phi_{x+L_\mu e_\mu} = \phi_x$ für $\mu = 1, \dots, d$ wird, wie bereits erwähnt, das Gitter zu einem Torus und die Skalarfeldtheorie ist invariant unter diskreten Translationen.
- *Feste Randbedingungen* $\phi|_{\partial\Lambda} = \text{fest}$.
- *Offene Randbedingungen:* In diesem Fall ist die Wechselwirkung der Felder mit den Nachbarfeldern am Rand $\partial\Lambda$ abzuändern, so dass nur Wechselwirkungen innerhalb des Gitters bestehen. Bei Festkörpern sind diese Randbedingungen am natürlichsten, allerdings können Oberflächenphänomene auftreten.

- *Antiperiodische Randbedingungen:* Diese dienen dazu, unerwünschte langreichweitige Korrelationen zu unterdrücken oder künstliche Grenzflächen zu erzeugen. Verallgemeinerungen von periodischen Randbedingungen sind in Gittertheorien beliebt. Wir werden in diesem Kapitel periodische Randbedingungen auferlegen.

Die euklidische Wirkung des freien Klein-Gordon-Feldes (5.14) soll zu einer Funktion des Gitterfeldes werden. Dabei wird das Integral durch eine Riemann-Summe und die partiellen Ableitungen durch Differenzen der Felder an benachbarten Gitterpunkten ersetzt. Hier hat man eine Freiheit bei der Wahl der Gitterableitung. Oft wählt man die *Vorwärts-* oder *Rückwärtsableitung*

$$(\partial_\mu \phi)(x) = \frac{\phi_{x+a\epsilon_\mu} - \phi_x}{a} \quad \text{oder} \quad (\partial_\mu \phi)(x) = \frac{\phi_x - \phi_{x-a\epsilon_\mu}}{a} \quad (5.64)$$

Für beide Wahlen lautet die diskretisierte Wirkung des freien Skalarfeldes

$$\begin{aligned} S &= \frac{a^{d-2}}{2} \sum_{\langle xy \rangle} (\phi_x - \phi_y)^2 + \frac{m^2 a^d}{2} \sum_x \phi_x^2 \\ &= \frac{a^{d-2}}{2} (2d + (am)^2) \sum_x \phi_x^2 - a^{d-2} \sum_{\langle xy \rangle} \phi_x \phi_y, \end{aligned} \quad (5.65)$$

wobei die letzte Summe über alle nächsten-Nachbarn Paare $\langle xy \rangle$ geht. Wie in der Quantenmechanik reskalieren wir dimensionsbehaftete Größen mit der Gitterkonstanten um zu dimensionslosen Größen zu gelangen. Die dimensionslose Masse m_L und das dimensionslose Gitterfeld ϕ_L lauten

$$am = m_L \quad \text{und} \quad a^{(d-2)/2} \phi = \phi_L, \quad (5.66)$$

der Abstand zwischen benachbarten Gitterpunkten wird zu 1 und das Gitter hat in Richtung μ die Länge $L_\mu = N_\mu$. Die Anzahl Gitterpunkte ist $V = N_1 \cdots N_d$. Im Folgenden werden wir den Index L an den Gittergrößen wieder unterdrücken.

Die Wirkung (5.65) definiert eine quadratische Form des Feldes,

$$S = \frac{1}{2} \sum_{x,y \in \Lambda} \phi_x K_{xy} \phi_y, \quad K_{xy} = (m^2 + 2d) \delta_{xy} - \sum_{\mu=1}^d (\delta_{x,y+e_\mu} + \delta_{x,y-e_\mu}). \quad (5.67)$$

Für eine positive Masse m ist die symmetrische Matrix (K_{xy}) positiv. Ist der Targetraum linear, dann fassen wir die $\{\phi_x | x \in \Lambda\}$ als Komponenten eines Vektors auf. Für ein reelles Skalarfeld auf einem Gitter Λ mit V Gitterpunkten ist dieser Vektorraum

gleich \mathbb{R}^V mit ℓ_2 -Skalarprodukt

$$(\phi, \chi) = \sum_{x \in \Lambda} \phi_x \chi_x. \quad (5.68)$$

Die Gitterwirkung (5.67) schreibt sich dann gemäß

$$S = \frac{1}{2}(\phi, K\phi) \quad \text{mit} \quad K = (K_{xy}). \quad (5.69)$$

Die Bestimmung der 2-Punktfunktion der freien euklidischen Theorie reduziert sich auf die Berechnung eines einfachen Gaußschen Integrals,

$$\langle \phi_x \phi_y \rangle = \frac{1}{Z} \int \mathcal{D}\phi \phi_x \phi_y e^{-\frac{1}{2}(\phi, K\phi)}, \quad \mathcal{D}\phi = \prod_{x \in \Lambda} d\phi_x \quad (5.70)$$

mit Zustandssumme

$$Z = \int \mathcal{D}\phi e^{-\frac{1}{2}(\phi, K\phi)} = (2\pi)^{V/2} \det^{-1/2} K. \quad (5.71)$$

Derartige Gaußsche Integrale wurden im zweiten Kapitel besprochen. Man findet folgenden Propagator für das freie Feld,

$$\langle \phi_x \phi_y \rangle = K_{x,y}^{-1} \equiv G(x, y). \quad (5.72)$$

Zu seiner Berechnung suchen wir die Eigenfunktionen und Eigenwerte der symmetrischen *Toeplitz-Matrix* K . Diese hängen von den Randbedingungen an das Skalarfeld ab. Für die hier gewählten periodischen Randbedingungen auf dem hyperkubischen Gitter ist K sogar zirkulant. Die Anzahl Gitterpunkte sei in jede Richtung N , so dass die Gesamtzahl Gitterpunkte $V = |\Lambda| = N^d$ ist.

Wegen der Translationsinvarianz auf dem diskreten Torus haben die V orthonormierten Eigenvektoren ψ_p der symmetrischen Matrix K in (5.67) die Form

$$\psi_p(x) = \frac{1}{\sqrt{V}} \exp(ipx) \quad \text{mit} \quad px = \sum_{\mu=1}^N p_\mu x^\mu. \quad (5.73)$$

Wegen der periodischen Randbedingungen liegen die Gitterimpulse auf dem *dualen Gitter*,

$$p_\mu = \frac{2\pi}{N} n_\mu \in \Lambda^*, \quad n_\mu \in \{1, 2, \dots, N\}. \quad (5.74)$$

Die zugehörigen $V = N^d$ Eigenwerte haben die Form

$$\lambda(p) = m^2 + 2d - 2 \sum_{\mu} \cos(p_{\mu}) = m^2 + \hat{p}^2, \quad \hat{p}_{\mu} = 2 \sin\left(\frac{1}{2}p_{\mu}\right). \quad (5.75)$$

Für den Propagator ergibt sich die Reihendarstellung

$$\langle \phi_x \phi_y \rangle = \sum \frac{\psi_p(x) \psi_p^{\dagger}(y)}{\lambda(p)} = \frac{1}{V} \sum_{\{p_{\mu}\}} \frac{e^{ip(x-y)}}{m^2 + \hat{p}^2}. \quad (5.76)$$

Diese Reihe enthält V Terme. Für Gitter mit unterschiedlichen Kantenlängen L_1, \dots, L_d muß in der obigen Formel n_{μ}/L durch n_{μ}/L_{μ} ersetzt werden.

Im thermodynamischen Limes $N \rightarrow \infty$ füllen die Gitterimpulse die *Brilloin-Zone* $(0, 2\pi]^d$ aus. Die Riemannsche Summe (5.76)

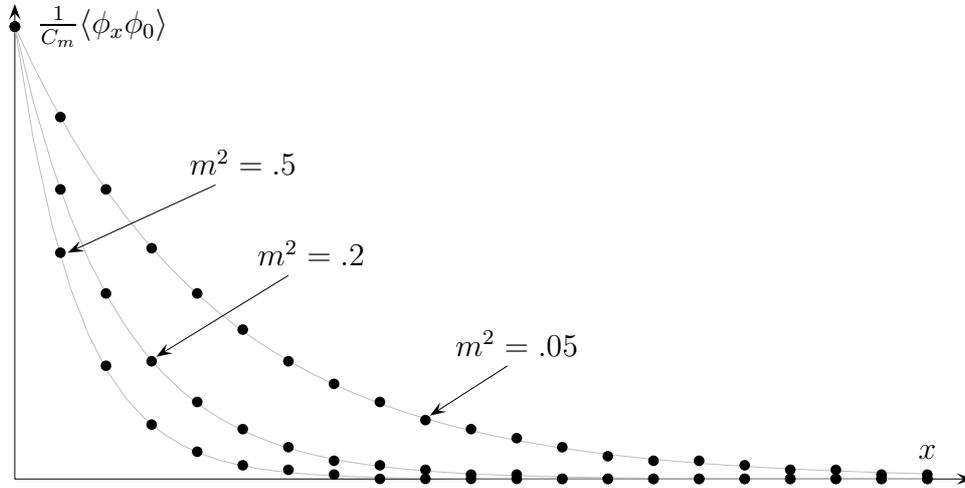
$$\langle \phi_x \phi_0 \rangle = \frac{1}{(2\pi)^d} \sum_{\{p_{\mu}\}} \Delta p_1 \cdots \Delta p_d \frac{e^{ipx}}{m^2 + \hat{p}^2}$$

mit $\Delta p_{\mu} = 2\pi/N$, strebt dann gegen das folgende Integral über die Brilloin-Zone,

$$\begin{aligned} \langle \phi_x \phi_0 \rangle &\xrightarrow{N \rightarrow \infty} \frac{1}{(2\pi)^d} \int_0^{2\pi} d^d p \frac{e^{ipx}}{m^2 + \hat{p}^2} \\ &= \frac{1}{(2\pi)^d} \int_0^{2\pi} d^d p \frac{\cos(px)}{m^2 + \hat{p}^2}, \quad \hat{p}_{\mu} = 2 \sin \frac{p_{\mu}}{2}. \end{aligned} \quad (5.77)$$

Die Zweipunktfunktion auf $\Lambda = \mathbb{Z}^d$ ist reell, invariant unter Gittertranslationen und Rotationen die das Gitter in sich überführen. Auf der Diagonalen ist ihr Wert

$$\langle \phi_0 \phi_0 \rangle \equiv C_m = \frac{1}{m\sqrt{m^2 + 4}} \quad (5.78)$$



In der Abbildung sind die (normierten) Werte der Zweipunktfunktion für drei Massen an den Gitterpunkten $x = 0, \dots, 20$ geplottet. Die exponentiellen Fits $\exp(-mx)$ für ganzzahlige x sind hervorragend. Für reelle x oszilliert das Integral (5.77) allerdings enorm um den exponentiellen Fit.

5.4 2-Punktfunktion als Wegintegral

Wir werden nun zeigen, dass sich die 2-Punktfunktion des freien Skalarfeldes (5.77) als „gewichtete Summe über alle Wege“ von x nach y darstellen lässt. Dieses Resultat ist nützlich für Abschätzungen und Näherungen. Wir betrachten die Größe

$$G(x) = e^{-\mu} \sum_{\text{Wege } 0 \rightarrow x} e^{-\mu\ell} = e^{-\mu} \sum_{\ell=0}^{\infty} P_{\ell}(x) e^{-\mu\ell} \quad (5.79)$$

auf dem unendlichen Gitter. Dabei ist ℓ die Länge des Weges (in Einheiten des Gitterabstandes) und μ ein noch festzulegender Parameter. $P_{\ell}(x)$ ist die Anzahl Wege der Länge ℓ von 0 zum Punkt $x \in \mathbb{Z}^d$. Für P_{ℓ} gibt es eine *erzeugende Funktion*,

$$(e^{ip_1} + e^{-ip_1} + \dots + e^{ip_d} + e^{-ip_d})^{\ell} = \sum_{x \in \mathbb{Z}^d} P_{\ell}(x) e^{i(p_1 x_1 + \dots + p_d x_d)}. \quad (5.80)$$

Zum Beweis multipliziert man die linke Seite aus. Dabei ergibt sich eine Summe über alle möglichen Kombinationen von jeweils ℓ Faktoren $e^{\pm ip_{\mu}}$. Jeder dieser Terme ist in eindeutiger Korrespondenz zu einem Weg der Länge ℓ auf dem Gitter, wenn man $e^{\pm ip_{\mu}}$ als Schritt in die $\pm\mu$ Richtung interpretiert. Die Summe über x konvergiert, da

$P_\ell(x) = 0$ für alle Punkte x , deren Abstand von 0 größer als ℓ ist.

			1		
		3		3	
	3		9		3
1		9	•	9	1
	3		9		3
		3		3	
			1		

In der Abbildung links sind beispielsweise die Anzahl Wege der Länge 3 auf einem 2-dimensionalen quadratischen Gitter angedeutet. So führen 9 verschiedenen Wege der Länge $\ell = 3$ vom Ursprung (durch einen Punkt gekennzeichnet) zu jedem nächsten Nachbarn. Für $\ell = 3$ gibt es keine Wege zu den übernächsten Nachbarn. Offensichtlich ist $P_3(x) = 0$ für Punkte x mit einem Abstand größer als 3. Die Anzahl Wege der Länge 3 ist $(2d)^3 = 64$.

Die Integration der Exponentialfunktion $\exp(ipx)$ über die Brillouin-Zone $p_\mu \in [0, 2\pi)$ ergibt 0, solange der Exponent nicht verschwindet. Damit können wir die Polynome P_ℓ wie folgt gewinnen,

$$P_\ell(x) = \frac{1}{(2\pi)^d} \int_0^{2\pi} d^d p e^{-ipx} (e^{ip_1} + e^{-ip_1} + \dots + e^{ip_d} + e^{-ip_d})^\ell \tag{5.81}$$

Eingesetzt in (5.79) erhält man eine geometrische Reihe,

$$\begin{aligned} G(x) &= \frac{e^{-\mu}}{(2\pi)^d} \int_0^{2\pi} d^d p e^{-ipx} \sum_\ell \{2e^{-\mu} (\cos p_1 + \dots + \cos p_d)\}^\ell \\ &= \frac{e^{-\mu}}{(2\pi)^d} \int_0^{2\pi} d^d p \left(\frac{e^{-ipx}}{1 - 2e^{-\mu} \sum_\mu \cos p_\mu} \right) \\ &= \frac{1}{(2\pi)^d} \int_0^{2\pi} d^d p \left(\frac{e^{-ipx}}{e^\mu - 2d + 4 \sum_\mu \sin^2 \frac{p_\mu}{2}} \right). \end{aligned} \tag{5.82}$$

Wir erkennen die Integraldarstellung der Zweipunktfunktion des freien Klein-Gordon-Feldes (5.77), vorausgesetzt wir wählen

$$e^\mu - 2d = m^2. \tag{5.83}$$

Die Auflösung nach $e^{-\mu}$ setzen wir in (5.79) ein mit dem Resultat

$$\langle \phi_x \phi_0 \rangle = \frac{1}{(m^2 + 2d)} \sum_{\text{Wege } 0 \rightarrow x} \frac{1}{(m^2 + 2d)^\ell}. \tag{5.84}$$

5.5 Zur Leibniz-Regel auf dem Gitter

Einige Probleme von Gitterfeldtheorien sind in der fehlenden Leibnizregel begründet. Man kann nämlich beweisen, dass es keine Gitterableitung gibt, welche diese Regel erfüllt.

Lemma *Ein linearer Operator D auf $\text{Map}(\Lambda, \mathbb{C}) \rightarrow \text{Map}(\Lambda, \mathbb{C})$, der die Leibnizregel*

$$D(f \cdot g) = (Df) \cdot g + f \cdot (Dg), \quad \forall f, g : \Lambda \rightarrow \mathbb{C}, \quad (5.85)$$

erfüllt, ist trivial, $D = 0$.

Beim Beweis benutzen wir die Leibnizregel in Komponentenform. Eine Gitterfunktion $f \in \text{Map}(\Lambda, \mathbb{C})$ wird mit dem entsprechenden V -komponentigen Vektor f_x identifiziert und der lineare Operator D mit einer $V \times V$ -Matrix D_{xy} ,

$$(Df)_x = \sum_{z \in \Lambda} D_{xz} f_z. \quad (5.86)$$

Dann lautet die Leibnizregel

$$\sum_z D_{xz} f_z g_z = g_x \sum_z D_{xz} f_z + f_x \sum_z D_{xz} g_z. \quad (5.87)$$

Wählen wir für f und g die charakteristische Funktion δ_y , wobei $\delta_y(z) = \delta_{y,z}$ ist, dann vereinfacht sie die Regel (5.87) zu

$$D_{xy} = D_{xy} \delta_{y,x} + D_{xy} \delta_{y,x}. \quad (5.88)$$

Daraus folgt sofort $D_{xy} = 0$ für alle $x, y \in \Lambda$. Das obige Lemma schliesst nicht aus, dass für spezielle Gitterfunktionen die Leibnizregel gilt.

Für periodische Gitterfunktionen werden wir fordern, dass

$$\sum_{x \in \Lambda} (Df)_x = 0 \quad (5.89)$$

gilt, in Anlehnung an die entsprechend Formel für Felder auf \mathbb{R}^d . Die Links- und Rechtsableitungen auf dem Gitter erfüllen diese Forderung.

5.6 Programme zu Kapitel 9

Das folgende `octave`-Programm `korrscalar` berechnet die Zweifunktfunction (5.77) als Funktion von x , dividiert durch die massenabhängige Konstante C_m in (5.78). Die resultierende Korrelationsfunktion ist 1 für $x = 0$. Abgefragt wird das Quadrat der Masse. Das Resultat und der exponentiellen Fit $\exp(-mx)$ mit der Masse im Propagator werden angezeigt.

```
function korrscalar;
# berechnet die Zweipunktsfunktion f"ur_freies
# Skalarfeld in einer Dimension mit der naiven
# Gitterableitung. Quadrat der Masse wird abgefragt.
# Speicherung in korrscalar.dat
#
m2=input("Masse_im_Quadrat_");
wco=sqrt(m2)*sqrt(4+m2)/(2*pi);# fuer Normierung des Integrals
closeplot;
Np=1001; eps=2*pi/(Np-1); # Np Stuetzstellen: ungerade!
p=linspace(0,2*pi,Np);ph=0.5*p;
sph=sin(ph);nenner=m2+4*sph.*sph;eps=eps/3;
#z=eps*cos(p).*cos(p);
z=eps./nenner;
# Fuer Simpson Integration;
for i=2:2:Np-1;
    z(i)=4*z(i);
endfor;
for i=3:2:Np-2;
    z(i)=2*z(i);
endfor;
x=linspace(0,20,21)';N=length(x);
int0=zeros(N,Np);
s0=zeros(N,1);
for i=1:N
    int0(i,:)=z.*cos(x(i)*p);
    s0(i)=sum(int0(i,:));
endfor;
s0=wco*s0;
data=[x,s0];#_Minimum_von_u_auf_0_setzen
data1=[x,exp(-sqrt(m2)*x)];
gplot[0:20]_data,_data1;
korrscalar=fopen("korrscalar.dat","w","native");
for i=1:N
    fprintf(korrscalar,("%4.2f,%4.2f"),x(i),s0(i));
    if_(rem(i,5)==0)_fprintf(korrscalar,"\n");
    endif;
endfor;
fclose(korrscalar);
endfunction;
```

5.7 Aufgaben

Aufgabe 10: Hohlraumstrahlung

Berechne die freie und innere Energiedichte für masselose skalare Teilchen in zwei und drei Dimensionen.

Kapitel 6

Klassische Spinmodelle

Man unterscheidet zwischen diskreten und kontinuierlichen Spinmodellen. Das reelle Skalarfeld auf dem Gitter ist ein *kontinuierliches Spinmodell*, da die Variablen auf den Gitterpunkten Werte im kontinuierlichen Targetraum $\mathcal{T} = \mathbb{R}$ annehmen. Als typisches Beispiel für ein *diskretes Spinmodell* mit diskretem Targetraum werden wir oft das *Ising-Modell* und seine Verallgemeinerungen bemühen. Hier ist der Targetraum \mathcal{T} sogar endlich. Das Ising-Modell dient als einfaches statistisches Modell für einen *Ferromagneten* mit „Elementarmagneten“ an den Punkten eines Kristallgitters, die sich entlang einer festen Achse ausrichten können. Von einem derart groben Modell sollte man keine genauen Resultate für realistische Spinsysteme erwarten. Es geht dabei eher um ein qualitatives Verständnis von Systemen mit sehr vielen und im Grenzfall unendlich vielen Freiheitsgraden. Von besonderem Interesse sind hierbei *Phasenübergänge* wie man sie bei Ferromagneten beobachtet: unterhalb der *Curie-Temperatur* T_c zeigt das Material eine spontane Magnetisierung, die oberhalb T_c verschwindet. Typische Vertreter der Ferromagneten sind Eisen, Kobalt und Nickel mit Curie-Temperaturen 1 043, 1 403 und 631 °K.

6.1 Isingartige Spinmodelle

Das Ising-Modell zählt zu den meistuntersuchten Modellen der statistischen Physik und man nennt es zurecht den harmonische Oszillator der statistischen Physik. Bei der Modellierung von Ferromagneten wird angenommen, daß die zu magnetischen Momenten führenden Spins der Gitteratome nur diskrete Zustände annehmen können. Der allgemeine Energieausdruck für eine solche Situation ist durch das

Heisenberg-Modell gegeben,

$$H = - \sum_{x,y \in \Lambda} J_{xy} s_x s_y - h \sum_{x \in \Lambda} s_x. \quad (6.1)$$

Hierbei bezeichnet s_x den mehrkomponentigen Spin des Atoms am Platz x des Kristallgitters, h ist das Magnetfeld und J_{xy} die Wechselwirkungsstärke (die Austauschkopplung) zwischen den Spins an den Gitterplätzen x und y . Beim Ising-Modell berücksichtigt man nur die Spinkomponente in Richtung einer ausgezeichneten Achse, d.h. parallel oder antiparallel zu einer ausgezeichneten Achse. Oft wird zusätzlich angenommen, dass J_{xy} nur für benachbarte Spins ungleich Null ist und nicht vom betrachteten Paar abhängt,

$$H = -J \sum_{\langle xy \rangle} s_x s_y - h \sum_{x \in \Lambda} s_x, \quad s_x \in \{-1, 1\}. \quad (6.2)$$

Ist die Austauschkopplung positiv, so spricht man von einer ferromagnetischen Kopplung; ist sie negativ, so wird sie antiferromagnetisch genannt. Das Modell (6.2) wurde 1920 von E. ISINGS Doktorvater WILHELM LENZ bei der Untersuchung des Ferromagnetismus eingeführt [37].

Das *eindimensionale Modell*, auch *Isingkette* genannt, wurde von ISING gelöst [38]. Die thermodynamischen Potentiale der Isingkette können exakt berechnet werden. Es zeigt sich, dass in einer Dimension das Phänomen der spontanen Magnetisierung noch nicht auftritt.

Für das *zweidimensionale Modell* gelang es PEIERLS 1936 erstmalig einen Beweis für die Existenz einer Tieftemperaturphase mit spontaner Magnetisierung zu führen [45]. Es tritt ein Phasenübergang bei endlicher Temperatur auf und 1941 konnten KRAMERS und WANNIER die Phasenübergangstemperatur T_c ohne Magnetfeld exakt berechnen [46]. Drei Jahre später konstruierte LARS ONSAGER dann mit algebraischen Methoden die exakte Lösung [47]. Mit Hilfe der Transfermatrix fand er den expliziten Ausdruck für die Zustandssumme für verschwindendes äußeres Magnetfeld. CASIMIR, der aufgrund der Verwicklungen des Zweiten Weltkriegs von den aktuellen Entwicklungen der Physik der 40er Jahre abgeschnitten war, fragte PAULI, was denn in der Theorie geschehen sei. PAULI antwortete:

Nicht so viel Interessantes ... außer Onsagers Lösung des zweidimensionalen Ising-Modells.

Dieser Kommentar soll verdeutlichen, welche Bedeutung Onsagers Lösung in der Theoretischen Physik zukommt. Schließlich sind Ising-artige Modelle die einzigen nicht-trivialen statistischen Modelle, die analytisch gelöst werden können und einen

Phasenübergang aufweisen. Heute sind mehrere Lösungsmethoden für das 2–dimensionale Ising-Modell bekannt und einige werden wir in dieser Vorlesung besprechen. Seine große Bedeutung erlangt das Modell auch dadurch, dass Näherungsverfahren durch Vergleich mit der exakten Lösung getestet werden können.

In *drei Dimensionen* gibt es bis heute keine exakte Lösung des Ising-Modells. Man ist auf Approximationen, zum Beispiel die Hoch- und Tieftemperaturentwicklungen oder Simulationen angewiesen. In vier und mehr Dimensionen werden wichtige Eigenschaften des Modells exakt durch die Mean-field Näherung beschrieben.

Nun zur Definition der Spinmodelle: Die Gitterpunkte $x = (x^1, \dots, x^d)$ sind Elemente eines d -dimensionalen einfach kubischen Gitters Λ mit Gitterkonstante $a = 1$. Wir benutzen dieselbe Notation wie bei der Untersuchung von Skalarfeldern auf dem Gitter in Kapitel 5. Oft wählen wir periodische Randbedingungen, für die $(x^1, \dots, N_\mu, \dots, x^d)$ und $(x^1, \dots, 1, \dots, x^d)$ nächste Nachbarn sind. Dann wird das Gitter zu einem (diskretisierten) Torus. Man wählt zunächst eine endliche Anzahl Gitterpunkte $V = N_1 \cdots N_d$, obwohl am Ende der thermodynamische Grenzfall $V \rightarrow \infty$ steht. Für $a = 1$ hat die Einheitszelle das Volumen Eins und V ist das Gittervolumen. Jedem Gitterpunkt wird eine \mathcal{T} -wertige Variable s_x zugeordnet. Wegen den periodischen Randbedingungen gilt

$$s_{x'} = s_x \quad \text{für} \quad x' = x + N_\mu e_\mu, \quad \mu = 1, \dots, d. \quad (6.3)$$

Hier ist e_μ der Einheitsvektor in Richtung μ . Jeder Punkt im Innern des hyperkubischen Gitters hat $2d$ nächste Nachbarn und $2d$ Linien (links) zu diesen Nachbarn.

Eine *Konfiguration* $w = \{s_x | x \in \Lambda\}$ ist eine mögliche Belegung der s_x ,

$$w : \Lambda \longrightarrow \mathcal{T} \times \mathcal{T} \times \cdots \times \mathcal{T} = \mathcal{T}^V. \quad (6.4)$$

Da jeder Spin $|\mathcal{T}|$ verschiedene Werte annehmen kann, gibt es für einen endlichen Targetraum $|\mathcal{T}|^V$ verschiedene Konfigurationen.

6.2 Beispiele von Spinsystemen

Hier stellen wir die bekanntesten Spinmodelle vor.

(1) *Ising-Modelle*: Wir beginnen mit dem bekannten und oben bereits vorgestellten Ising-Modell mit Targetraum $\mathbb{Z}_2 = \{-1, 1\}$ und entsprechend 2^V verschiedenen Kon-

figurationen. Die Energie einer Konfiguration ist gleich

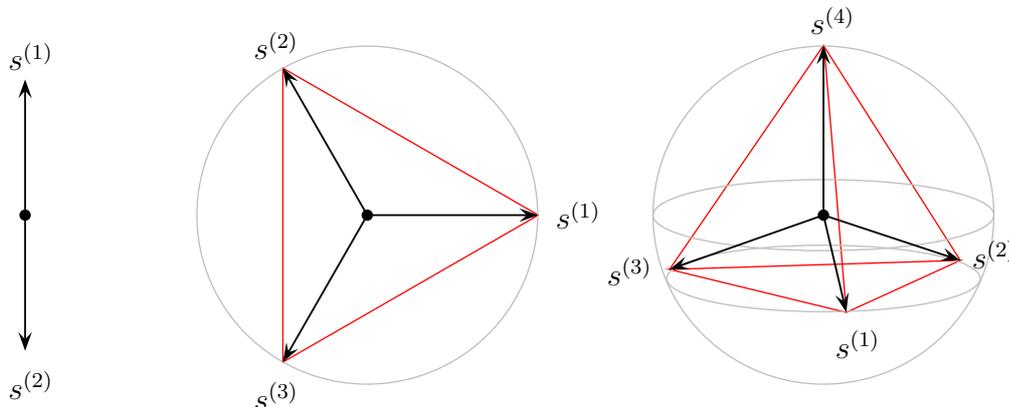
$$H_{\Lambda}^{\text{Ising}}(w) = -J \sum_{\langle xy \rangle} s_x s_y - h \sum_x s_x \quad \text{mit} \quad s_x \in \{-1, 1\}. \quad (6.5)$$

Dabei bezeichnet $\langle xy \rangle$ ein Paar von nächsten Nachbarn der Gitterpunkte. J ist die Kopplungsstärke zwischen benachbarten Spins und h ein äußeres Magnetfeld. Oft werden wir den Spezialfall $h = 0$ betrachten. Dann wird für $J > 0$ die Energie minimal wenn alle Spins den gleiche Wert annehmen und dies ist die Eigenschaft eines *Ferromagneten*.

(2) *Potts-Modelle*: POTTS fand seine verallgemeinerten Ising-Modelle nach einem entsprechenden Vorschlag von DOMB [39]. In seiner Arbeit untersuchte er die sogenannten \mathbb{Z}_N -Modelle und die nach ihm benannten Modelle. Für beide Familien wird jedem Gitterpunkt eine q -wertige Variable σ_x zugeordnet und entsprechend gibt es q^V Konfigurationen. Im Potts-Modell ist die Energie einer festen Konfiguration gleich

$$H_{\Lambda}^{\text{Potts}}(w) = -J \sum_{\langle x,y \rangle} \delta(\sigma_x, \sigma_y) - h \sum_x \delta(\sigma_x, 1), \quad \sigma_x \in \{1, 2, \dots, q\}, \quad (6.6)$$

wobei $\delta(\sigma_x, \sigma_y)$ das Kroneckersymbol ist. Das Modell mit $q = 2$ ist identisch zum Ising-Modell. Allgemeiner kann der Hamiltonian (6.6) in die Form (6.5) für q Vektoren in \mathbb{R}^{q-1} gebracht werden. Als Targetraum wählen wir die Menge der Vektoren $\{s^{(1)}, \dots, s^{(q)}\}$ die vom Ursprung in Richtung von q auf der Einheitssphäre in \mathbb{R}^{q-1} gleichmäßig verteilte Punkte zeigen. Diese Punkte sind die Vertices eines q -Simplex oder eines regulären q -Eder (q -hedron). Die Spezialfälle $q = 2, 3, 4$ sind in der Abbildung zu sehen.



Wegen $\sum s^{(\sigma)} = 0$ haben diese Einheitsvektoren die Skalarprodukte

$$s^{(\sigma)} \cdot s^{(\sigma')} = \begin{cases} 1 & \text{für } \sigma = \sigma' \\ -\frac{1}{q-1} & \text{sonst.} \end{cases} \quad (6.7)$$

Die Existenz dieser Vektoren kann mit Hilfe der Induktion nachgewiesen werden. Ordnen wir der Variablen σ_x am Gitterplatz x den Vektor $s^{(\sigma_x)} = s_x$ zu, dann gilt

$$s_x \cdot s_y = \tilde{q} \delta(\sigma_x, \sigma_y) - \frac{1}{q-1} \quad \text{mit} \quad \tilde{q} = \frac{q}{q-1}. \quad (6.8)$$

Eingesetzt in (6.6) findet man für die Energiefunktion

$$H_{\Lambda}^{\text{Potts}}(w) = -\tilde{J} \sum_{\langle x,y \rangle} s_x \cdot s_y - \tilde{h} s^{(1)} \cdot \sum_x s_x - C \quad \text{mit} \quad J = \tilde{q}\tilde{J}, \quad h = \tilde{q}\tilde{h}, \quad (6.9)$$

und einer irrelevanten additiven Konstante

$$C = \tilde{J} \cdot (\text{Anzahl nächste Nachbarn}) + \tilde{h} \cdot (\text{Anzahl Gitterpunkte}).$$

Insbesondere ist das $q = 2$ das Potts-Modell gleich dem Ising-Modell. Das Modell mit $q = 1$ steht mit dem Bond-Perkolationsmodell in enger Beziehung.

(3) *O(n)-Modelle*: Diese haben den kontinuierlichen und kompakten Targetraum $S^{n-1} \subset \mathbb{R}^n$ und die Energiefunktion ist

$$H_{\Lambda}^{O_n}(w) = -J \sum_{\langle x,y \rangle} s_x \cdot s_y \quad \text{mit} \quad s_x \in \mathbb{R}^n, \quad s_x \cdot s_x = 1, \quad (6.10)$$

wobei der Punkt das gewöhnliche Skalarprodukt im \mathbb{R}^n ist und die Kopplung J positiv sein soll. Ist R eine Rotation im \mathbb{R}^n , dann gilt

$$Rs_x \cdot Rs_y = s_x \cdot s_y$$

und deshalb ist die Energie invariant unter globalen Drehungen der Spinvariablen,

$$H_{\Lambda}(Rw) = H_{\Lambda}(w), \quad Rw = \{Rs_x \mid x \in \Lambda\} \quad (6.11)$$

Dieser $O(n)$ -Invarianz verdankt das Modell seinen Namen. Für $n = 2$ heißt das Modell auch *Rotor-Modell* und für $n = 3$ *klassisches Heisenberg-Modell*.

(4) *Gaußsches Modell*: Wir notieren, dass für $h = 0$ die Energiefunktionen der betrach-

teten Modelle bis auf eine additive Konstante die allgemeine Form

$$H_\Lambda(w) = \frac{1}{2} \sum_{x,y} J_{xy} (s_x - s_y)^2 \quad (6.12)$$

mit passenden Kopplungskonstanten J_{xy} haben. Diese Aussage ist richtig, weil die Spinvariablen s_x eine feste Länge haben. Dies legt nahe, die allgemeinere Klasse von Modellen mit $s_x \in \mathbb{R}$ und Energiefunktion

$$H_\Lambda(w) = \frac{1}{2} \sum_{x,y} J_{xy} (s_x - s_y)^2 \quad (6.13)$$

zu untersuchen. Für spezielle Kopplungen J_{xy} geht sie über in den kinetischen Term für das freie Skalarfeld auf dem Gitter. Dabei wird der kontinuierliche Spin s_x mit dem Wert ϕ_x des Gitterfeldes am Punkt x identifiziert.

(5) *Wechselwirkende kontinuierliche Spins*: Läßt man noch eine Selbstwechselwirkung der Spinvariablen $s_x \in \mathbb{R}$ zu, dann hat die Energiefunktion die Form

$$H_\Lambda(w) = \frac{1}{2} \sum_{x,y} J_{xy} (s_x - s_y)^2 + \sum_x V(s_x). \quad (6.14)$$

Für spezielle Kopplungen J_{xy} ist diese Energiefunktion für die kontinuierlichen Spins gleich der euklidischen Wirkung für das wechselwirkende Skalarfeld. Analog kann die Energiefunktion (6.10) des $O(N)$ -Modells als euklidischen Wirkung für das Sigma-Modell auf dem Gitter,

$$S_\Lambda^{\text{Sigma}}(w) = \frac{1}{2g^2} \sum_{\langle xy \rangle} (\phi_x - \phi_y)^2, \quad \phi_x \in \mathbb{R}^n, \quad \phi_x \cdot \phi_x = 1 \quad (6.15)$$

identifiziert werden.

Die Identifikation von Spinkonfigurationen als Gitterfelder einer diskretisierten euklidischen Feldtheorie und von Energiefunktionen als euklidische Wirkungen,

$$\begin{aligned} w = \{s_x | x \in \Lambda\} &\longleftrightarrow w = \{\phi_x | x \in \Lambda\} \\ \beta H(w) &\longleftrightarrow S_E(w)/\hbar \end{aligned} \quad (6.16)$$

war und ist sehr fruchtbar für den Fortschritt der Quantenfeldtheorie als auch der statistische Physik. Insbesondere erlaubt sie uns die mächtigen Methoden der statistischen Physik auf Probleme der Quantenfeldtheorien bei Temperatur Null oder bei endlichen Temperaturen anzuwenden.

6.3 Spinsysteme im Gleichgewicht

In der statistischen Physik sehen wir von einer exakten Beschreibung der Systemdynamik ab. Man braucht nicht alle mikroskopischen Freiheitsgrade zu kennen um makroskopische Variablen wie etwa Druck oder Magnetisierung zu bestimmen. Wir beschreiben das System durch eine sogenannten *Dichtematrix*, die angibt, mit welcher Wahrscheinlichkeit eine Konfiguration auftritt. Im hier interessierenden *kanonischen Ensemble* bestimmt die Energie $H(w)$ einer Konfiguration w deren Wahrscheinlichkeit. Für allgemeinere Spinsysteme wird die Energiefunktion von mehreren Parametern $\lambda = (\lambda_1, \dots, \lambda_n)$ abhängen. Diese können zum Beispiel Kopplungen zwischen den Spins oder der Spins an äussere Felder beschreiben. Im kanonischen Ensemble tritt eine Konfiguration w mit einer dem Boltzmannfaktor

$$\exp(-\beta H_\Lambda(w)), \quad \beta = \frac{1}{k_b T} \quad (6.17)$$

proportionalen Wahrscheinlichkeit auf. T bezeichnet die absolute Temperatur und k_b die Boltzmannkonstante. Die Zustandssumme ist durch

$$Z_\Lambda(\beta, \lambda) = \sum_w \exp(-\beta H_\Lambda(w)) \quad (6.18)$$

gegeben. Für diskrete Systeme erstreckt sich die Summe über alle Konfigurationen der V Spins. Für kontinuierliche Systeme wird die Summe zu einem Integral über alle Gittervariablen. Zum Beispiel für das Gaußsche Modell

$$Z_\Lambda(\beta) = \int \mathcal{D}w e^{-\beta H(w)}, \quad H(w) = \frac{1}{2} \sum_{x,y} J_{xy} (s_x - s_y)^2, \quad (6.19)$$

mit dem apriori Lebesgue Maß auf \mathbb{R}^V ,

$$\mathcal{D}w = \prod_{x \in \Lambda} ds_x, \quad s_x \in \mathbb{R}. \quad (6.20)$$

Die Zustandssummen der $O(n)$ -Modelle hat eine ähnliche Form wie (6.19),

$$Z_\Lambda(\beta, J) = \int d\mu(w) e^{-\beta H(w)}, \quad H(w) = -J \sum_{x,y} s_x \cdot s_y, \quad (6.21)$$

allerdings mit dem von \mathbb{R}^n auf die Sphäre S^{n-1} induzierten apriori Maß,

$$d\mu(w) = \prod_{x \in \Lambda} d\mu(s_x), \quad d\mu(s) = \delta(s^2 - 1) ds, \quad s_x \in \mathbb{R}^n. \quad (6.22)$$

Im Allgemeinen hängt die Zustandssumme von der inversen Temperatur β , den Parametern λ in der Energiefunktion und dem Gitter Λ ab.

Für ein diskretes Spinmodell ist der Erwartungswert einer Observablen $A(w)$ im kanonischen Ensemble gegeben durch

$$\langle A \rangle_\Lambda(\beta, \lambda) = \frac{1}{Z_\Lambda(\beta, \lambda)} \sum_w A(w) e^{-\beta H_\Lambda(w)}, \quad (6.23)$$

und für ein kontinuierliches Modell durch

$$\langle A \rangle_\Lambda(\beta, \lambda) = \frac{1}{Z_\Lambda(\beta, \lambda)} \int d\mu(w) A(w) e^{-\beta H_\Lambda(w)}. \quad (6.24)$$

Im Folgenden werden wir nur noch die Abhängigkeit von den jeweils relevanten Systemparametern andeuten, zum Beispiel von der inversen Temperatur β und dem Gitter Λ . Wir werden die Notation für diskrete Spinmodelle benutzen. Die entsprechenden Formeln für kontinuierlichen Modelle erhält man nach der Ersetzung $\sum_w \rightarrow \int d\mu(w)$.

Die wichtigsten Größen der Thermodynamik lassen sich aus der Zustandssumme ableiten. Zum Beispiel ist die *Helmholtzsche freie Energie* proportional zum Logarithmus der Zustandssumme,

$$F_\Lambda(\beta) = -\frac{1}{\beta} \log Z_\Lambda(\beta). \quad (6.25)$$

Im thermodynamischen Grenzfall $V \rightarrow \infty$ divergiert diese extensive Größe und man benutzt statt ihrer die *freie Energiedichte*

$$f_\Lambda(\beta) = \frac{1}{V} F_\Lambda(\beta). \quad (6.26)$$

Für kurzreichweitige Wechselwirkungen wie im Ising-Modell wird im thermodynamischen Grenzfall $V \rightarrow \infty$ die freie Energiedichte gegen die freie Energiedichte im unendlichen Volumen konvergieren,

$$f_\Lambda(\beta) \xrightarrow{V \rightarrow \infty} f(\beta). \quad (6.27)$$

Die Energie einer einzelnen Konfigurationen ist dem Experimentator nicht zugäng-

lich. Gemessen wird der Erwartungswert der Energie im Gleichgewichtszustand, die sogenannte *innere Energie*

$$\begin{aligned} U_\Lambda(\beta) &= \langle H \rangle_\Lambda(\beta) = \frac{1}{Z_\Lambda(\beta)} \sum_w H_\Lambda(w) e^{-\beta H_\Lambda(w)} \\ &= -\frac{1}{Z_\Lambda(\beta)} \frac{\partial}{\partial \beta} \sum_w e^{-\beta H_\Lambda(w)} = -\frac{\partial}{\partial \beta} \log Z_\Lambda(\beta). \end{aligned} \quad (6.28)$$

Ersetzen wir den Logarithmus der Zustandssumme durch die freie Energie, dann folgt

$$U_\Lambda(\beta, h) = \frac{\partial}{\partial \beta} (\beta F_\Lambda(\beta, h)) = F_\Lambda(\beta, h) - T \frac{\partial}{\partial T} F_\Lambda(\beta, h). \quad (6.29)$$

Die Magnetisierung einzelner Spinkonfigurationen ist uninteressant, im Gegensatz zur mittleren *makroskopischen Magnetisierung*. Sie entspricht der 1-Punktfunktion

$$m := \langle M \rangle = \langle s_x \rangle = -\frac{1}{V} \frac{\partial}{\partial h} F_\Lambda(\beta, h) = -\frac{\partial}{\partial h} f_\Lambda(\beta, h), \quad M = \frac{1}{V} \sum_x s_x. \quad (6.30)$$

Die zweite Gleichung gilt wegen der Translationsinvarianz auf dem Gitter mit periodischen Randbedingungen.

Genauere Informationen über das System erhält man aus den n -Punkt Korrelationsfunktionen

$$G^{(n)}(x_1, \dots, x_n) = \langle s_{x_1} \cdots s_{x_n} \rangle, \quad x_1, \dots, x_n \in \Lambda. \quad (6.31)$$

Speziell die Zweipunktfunktion

$$G^{(2)}(x, y) \equiv G(x, y) = \langle s_x s_y \rangle \quad (6.32)$$

beschreibt die Korrelation zwischen zwei möglicherweise weit voneinander entfernten Spins. Ist sie zum Beispiel positiv, so gibt es eine Tendenz für diese Spins parallel zu stehen. Gilt dies für beliebig weit entfernte Spins, so liegt *spontane Magnetisierung* vor. Kennt man alle Korrelationsfunktionen, dann kann man im Prinzip den Gibbs-Zustand rekonstruieren.

An dieser Stelle ist ein interessanter Unterschied zwischen klassischen Spinmodellen und diskretisierten euklidischen Quantenfeldtheorien bemerkenswert. Bei den Spinmodellen rührt die Temperaturabhängigkeit vom temperaturabhängigen Boltz-

mannfaktor des Wahrscheinlichkeitsmaßes

$$dP_\beta(w) = \frac{1}{Z_\Lambda(\beta)} e^{-\beta H(w)} d\mu(w) \quad (6.33)$$

mit dem die Erwartungswerte im thermischen Gleichgewicht berechnet werden. In einer euklidischen Gitterfeldtheorie mit Wahrscheinlichkeitsmaß

$$dP_\beta(w) = \frac{1}{Z_\Lambda(\beta)} e^{-S(w)} d\mu(w) \quad (6.34)$$

kommt die Temperaturabhängigkeit von der Geometrie des zugrundeliegenden Gitters. Bei Temperatur T hat das Gitter in die euklidische Zeitrichtung die Länge β und das Gitterfeld ist periodisch mit Periode β .

6.4 Variationsprinzipien

In diesem Abschnitt studieren wir die auf Variationsprinzipien beruhenden Definitionen der Zustandssumme und der effektiven Wirkung. Wir benutzen die Notation für kontinuierlichen Spinmodelle um den Zusammenhang zu den Gitterfeldtheorien zu unterstreichen. Näheres findet man auch im Buch von Roepstorff [17]. Es sei P ein Wahrscheinlichkeitsmass mit Dichte $p \geq 0$ auf dem Konfigurationsraum,

$$dP(w) = p(w) d\mu(w) \quad \text{mit} \quad \int dP(w) = 1. \quad (6.35)$$

Die *Boltzmann-Gibbs-Shannon Entropie* ist definiert als

$$S_B(P) = - \int d\mu(w) p(w) \log p(w). \quad (6.36)$$

Die freie Energie hat nun folgende variationelle Charakterisierung,

$$\beta F = \inf_P \left(\beta \int dP(w) H(w) - S_B(P) \right). \quad (6.37)$$

Das Infimum ist bezüglich aller Wahrscheinlichkeitsmasse zu nehmen. Die Nebenbedingung in (6.35) erzwingen wir mit Hilfe der Addition von $\lambda(\int dP(w) - 1)$ mit Lagrange Multiplikator λ . Das Extremum des Ausdrucks in Klammern unter Variationen von $p(w)$ führt dann auf

$$0 = \int d\mu(w) \delta p(w) (\beta H(w) + \log p(w) + 1 + \lambda) \Rightarrow p(w) = \text{const} \cdot e^{-\beta H(w)}.$$

Das eindeutige Infimum bezüglich aller *Wahrscheinlichkeitsmasse* ist also das Gibbs-Maß

$$dP_\beta(w) = \frac{1}{Z} e^{-\beta H(w)} d\mu(w) \quad \text{mit} \quad Z = \int d\mu(w) e^{-\beta H(w)}. \quad (6.38)$$

Eingesetzt in (6.37) ergibt sich der bekannte Ausdruck für die freie Energie,

$$F = -\frac{1}{\beta} \log Z. \quad (6.39)$$

Das thermodynamische Äquivalent zur *effektiven Wirkung* in der Feldtheorie ist das freie Energiefunktional bei Vorgabe eines im Allgemeinen inhomogenen mittleren Spinfeldes m_x . Dieses Funktional kann ebenfalls über ein Variationsprinzip definiert werden,

$$\beta F[m] = \inf_P \left(\beta \int dP(w) H(w) - S_B(P) \mid \int dP(w) s_x = m_x \right). \quad (6.40)$$

Hier wird bezüglich aller Wahrscheinlichkeitsmasse P bei vorgegebenen mittleren Spinfeld minimiert. Das resultierende $F[m]$ ist konvex, da die Menge der Wahrscheinlichkeitsmasse konvex ist. Wir werden nun zeigen, daß F die Legendre-Transformierte des Schwinger-Funktional ist. Dazu erzwingen wir die Nebenbedingung in (6.40) mit Hilfe eines Lagrange-Multiplikatorfeldes j_x . Zuerst minimiert man

$$\beta F[m] = \inf_P \left(\int dP(w) \{ \beta H(w) - (j, s - m) \} - S_B(P) \right),$$

wobei $(j, s) = \sum_x j_x s_x$ das ℓ_2 -Skalarprodukt ist, bezüglich aller Wahrscheinlichkeitsmasse. Das minimierende Maß ist

$$dP_j(w) = \frac{1}{Z[j]} e^{-\beta H(w) + (j, s)} d\mu(w) \quad \text{mit} \quad Z[j] = \int d\mu(w) e^{-\beta H(w) + (j, s)} \quad (6.41)$$

Eingesetzt in (6.40) findet man folgende einfache Formel für $F[m]$,

$$\beta F[m] = (j, m) - W[j] \quad \text{mit} \quad W[j] = \log Z[j]. \quad (6.42)$$

Darin ist die Quelle j so zu wählen, dass die Nebenbedingung (6.40) an das mittlere Feld m_x erfüllt ist,

$$m_x = \int dP_j(w) s_x = \frac{\delta W[j]}{\delta j_x}. \quad (6.43)$$

Das Resultat (6.42,6.43) bedeutet, dass $F[m]$ die Legendre Transformierte der Schwinger-Funktion ist,

$$\beta F[m] = \sup_j ((j, m) - W[j]) = (\mathcal{L}W)[m]. \quad (6.44)$$

Ist man nur an der mittleren Magnetisierung und nicht an allgemeinen Korrelationsfunktionen der Spins interessiert, dann genügt es das freie Energiefunktional $F[m]$ für ein konstantes mittleres Spinfeld $m_x = m$ zu bestimmen. Für ein translationsinvariantes System ist der Mittelwert von $\langle s_x \rangle$ gleich dem Mittelwert von $M = \sum_x s_x/V$ und entsprechend löst die freie Energiedichte $f(m)$ das Variationsprinzip

$$\beta f(m) = \frac{1}{V} \inf_P \left(\beta \int dP(w) H(w) - S_B(P) \mid \int dP(w) M = m \right). \quad (6.45)$$

Ähnlich wie bei der effektiven Wirkung beweist man, dass

$$\beta f(m) = (\mathcal{L}w)(m) \quad \text{mit} \quad w(j) = \frac{1}{V} \log \int d\mu(w) e^{-\beta H(w) + j \sum s_x}. \quad (6.46)$$

Der Übergang von den Spinmodellen bei endlichen Temperaturen zu Gitterfeldtheorien geschieht durch die Ersetzungen

$$\beta H \longrightarrow S/\hbar, \quad \beta F[m] \longrightarrow \Gamma[\varphi]/\hbar, \quad \beta f(m) \longrightarrow u(\varphi)/\hbar. \quad (6.47)$$

Insbesondere hat die effektive Wirkung des quantisierten Skalarfeldes folgende variationelle Charakterisierung,

$$\Gamma[\varphi] = \inf_P \left(\int dP(w) S(w) - \hbar S_B(P) \mid \int dP(w) \phi_x = \varphi_x \right). \quad (6.48)$$

Das konvexe Γ ist die Legendre-Transformierte des Schwingerfunktionals,

$$\Gamma[\varphi] = (\mathcal{L}W)[\varphi] \quad \text{mit} \quad W[j] = \log \int \mathcal{D}w e^{-S(w)/\hbar + (j, \phi)}. \quad (6.49)$$

Entsprechend findet man für das oben eingeführte effektive Potential

$$u(\varphi) = (\mathcal{L}w)(\varphi) \quad \text{mit} \quad w(j) = \frac{1}{\beta V} \log \int d\mu(w) e^{-S(w) + j \sum \phi_x}. \quad (6.50)$$

Im klassischen Grenzfall geht die effektive Wirkung Γ in die klassische Wirkung über. Die variationelle Charakterisierung der effektive Wirkung oder des effektiven Poten-

tials ist ein Ausgangspunkt für die nützliche Mean-Field Näherung. Diese wird im nächsten Kapitel besprochen.

6.5 Aufgaben

Aufgabe 11: 2-dimensionales Ising Modell, Teil I

Bestimmen Sie mittels Summation über alle Konfigurationen die innere Energiedichte und die Magnetisierung für ein 2×2 , 3×3 und 4×4 Gitter mit periodischen Randbedingungen für $\beta = 0.0$ bis 1.0 in Schritten von 0.05 . Das äußere Feld sei Null ($h = 0$). Stellen Sie das Resultat in einem Plot dar.

Setzen sie J in

$$H = -J \sum_{\langle xy \rangle} s_x s_y$$

gleich 1. Berechnen Sie sowohl $\langle m \rangle$ als auch $\langle |m| \rangle$. Kann man auch ohne Rechnung sagen, welchen Wert $\langle m \rangle$ annimmt?

Aufgabe 12: 2-dimensionales Ising Modell, Teil II

Verwenden Sie das gegebene Programm (siehe Homepage) zur Simulation des 2D Isingmodells bei $\beta = 0.4406868$ und $h = 0$ mit dem Metropolisalgorithmus. Simulieren Sie für Gittergrößen 4×4 , 8×8 und 32×32 . Führen Sie dazu jeweils 200000 sweeps über das Gitter aus. Bestimmen Sie

$$u = \frac{1}{V} \langle H \rangle, \quad \langle |m| \rangle \quad \text{und} \quad \langle m^2 \rangle$$

Vergleichen Sie das Resultat für das 4×4 Gitter mit dem Resultat der analytischen Rechnung.

Kapitel 7

Molekularfeldnäherung

Nur wenige statistisch-mechanische Modelle können explizit gelöst werden und deshalb ist man an effizienten Näherungsmethoden interessiert. Eine solche liefert die Molekularfeldnäherung. Diese Näherung ist relativ einfach und universell einsetzbar. Sie firmiert auch unter anderen Namen: *mean field Näherung*, *Curie-Weiss-Näherung* (für Ferromagnete) oder *Bragg-Williams-Näherung* (für Gittergase). Molekularfeldnäherungen sind relativ leicht zu bekommen und geben schon qualitativ richtige Resultate. Wir besprechen hier die Molekularfeldnäherung für Spinmodelle und Euklidische Gitterfeldtheorien in beliebigen Dimensionen.

7.1 MFA für Spinmodelle

In der mean-field Approximation (MFA) lässt man im Variationsprinzip (6.40) nur Produktmasse zu,

$$dP(w) = \prod_x d\nu_x(s_x), \quad d\nu_x(s) = d\mu(s)p_x(s). \quad (7.1)$$

Dabei ist $\nu_x(s)$ ein Wahrscheinlichkeitsmass auf dem Targetraum des Spinmodells und μ das x -unabhängige apriori-Maß. Da man in der Molekularfeldnäherung nur bezüglich einer Teilmenge von Wahrscheinlichkeiten minimiert, beschränkt das freie Energiefunktional in dieser Näherung $F_{\text{MF}}[m]$ das exakte Funktional $F[m]$ von oben,

$$F_{\text{MF}}[m] \geq F[m]. \quad (7.2)$$

Im Gegensatz zur Menge aller Wahrscheinlichkeitsmasse ist die Teilmenge der Produktmasse nicht konvex und deshalb braucht F_{MF} nicht konvex zu sein. Zur Berech-

nung von F_{MF} notieren wir

$$dP(w) \log p(w) = \prod_x d\nu_x(s_x) \sum_y \log p_y(s_y),$$

so dass aufgrund von $\int d\nu_x(s) = 1$ die Entropie des Gesamtsystems die Summe der Entropien auf den Gitterpunkten wird,

$$S_{\text{B}}(P) = \sum_x S_{\text{B}}(p_x) \quad \text{mit} \quad S_{\text{B}}(p_x) = - \int d\nu_x(s) \log p_x(s). \quad (7.3)$$

Die Zwangsbedingung in (6.40) faktorisiert,

$$\int d\nu_x(s) s = m_x. \quad (7.4)$$

Wir untersuchen hier allgemeine Spinsysteme mit Energiefunktionen

$$H(w) = - \sum_{x \neq y} J_{xy} s_x s_y - h \sum_x s_x + \sum_x A(s_x), \quad s_x \in \mathcal{T}. \quad (7.5)$$

Wegen der Nebenbedingung (7.4) gilt für Produktmaße

$$\int dP(w) H(w) = - \sum_{x \neq y} J_{xy} m_x m_y - h \sum_x m_x + \sum_x \int d\nu_x(s) A(s), \quad (7.6)$$

Damit lautet die Molekularfeldnäherung für das freie Energiefunktional

$$\begin{aligned} F_{\text{MF}}[m] &= - \sum_{\langle xy \rangle} J_{xy} m_x m_y - h \sum_x m_x + \sum_x \alpha_{\text{MF}}(m_x), \quad \text{mit} \\ \beta \alpha_{\text{MF}}(m) &= \inf_p \left\{ \int d\nu(s) \{ \beta A(s) + \log p(s) \} \mid \int d\nu(s) s = m \right\}. \end{aligned} \quad (7.7)$$

Für die minimierende Wahrscheinlichkeitsdichte findet man mit der Multipliemethode

$$p_j(s) = \frac{1}{z_0(j)} e^{-\beta A(s) + js} \quad \text{mit} \quad z_0(j) = \int d\mu(s) e^{-\beta A(s) + js}, \quad (7.8)$$

wobei j aus der Selbstkonsistenzgleichung (Gapgleichung) zu berechnen ist

$$m = \frac{1}{z_0(j)} \int_{\mathcal{T}} d\mu(s) e^{-\beta A(s) + js} s = \frac{dw_0}{dj}, \quad w_0(j) = \log z_0(j). \quad (7.9)$$

Für das minimierende Mass $d\nu(\phi)$ in (7.8) vereinfacht sich α_{MF} zu

$$\beta\alpha_{\text{MF}}(m) = jm - w_0(j) = (\mathcal{L}w_0)(m). \quad (7.10)$$

Für ein homogenes mittleres Spinfeld ist $F_{\text{MF}}[m] = V f_{\text{MF}}(m)$ mit freien Energiedichte

$$f_{\text{MF}}(m) = -\frac{\tilde{J}m^2}{2} - hm + \alpha_{\text{MF}}(m) \quad \text{mit} \quad \tilde{J} = \frac{2}{V} \sum_{x,y} J_{xy}. \quad (7.11)$$

Ist wie beim Isingmodell $J_{xy} = J$ für nächste Nachbarn x und y und sonst gleich Null, dann ist die effektive Kopplung \tilde{J} für ein hyperkubisches Gitter

$$\tilde{J} = 2dJ. \quad (7.12)$$

Nur über diese Relation geht die Dimension des Gitters in die Molekularfeldapproximation ein. Für nicht-hyperkubische Gitter lautet die Beziehung $\tilde{J} = qJ$, wobei q die Anzahl nächster Nachbarn eines Gitterpunktes ist.

7.1.1 MFA für das Isingmodell

Wir können die allgemeinen Resultate sofort auf das Isingmodell übertragen, wenn wir den Isingspin als reellwertig ansehen, $\mathcal{T} = \mathbb{R}$, und die Einschränkung auf die Werte ± 1 mit Hilfe des a priori Punktmaßes erzwingen,

$$d\mu(w) = \prod_x d\mu(s_x), \quad d\mu(s) = \delta(s-1) + \delta(s+1). \quad (7.13)$$

Für das Isingmodell verschwindet A in (7.8) und

$$z_0(j) = 2 \cosh j. \quad (7.14)$$

Es genügt hier das freie Energiefunktional für ein konstantes mittleres Feld zu untersuchen und zur freien Energiedichte überzugehen,

$$f_{\text{MF}} = -dJm^2 - hm + T(\mathcal{L}w_0)(m). \quad (7.15)$$

Man beachte, daß im Gegensatz zur mikroskopischen Spinvariablen s_x das gemittelte Spinfeld m kontinuierlich ist, $m \in [-1, 1]$.

Wir benötigen noch die Legendre-Transformierte von $w_0 = \log(2 \cosh j)$. Dazu lö-

sen wir $m = \tanh j$ nach j auf, und benutzen das Resultat $j(m) = \arctan m$ in

$$(\mathcal{L}w_0)(m) = jm - \log(2 \cosh j). \quad (7.16)$$

Eingesetzt in (7.15) finden wir für die freie Energiedichte bei homogenen mittleren Feld in der Molekularnäherung den einfachen Ausdruck

$$f_{\text{MF}}(m) = -\frac{\tilde{J}m^2}{2} - hm + \frac{1+m}{2\beta} \log \frac{1+m}{2} + \frac{1-m}{2\beta} \log \frac{1-m}{2}. \quad (7.17)$$

Eine alternative Herleitung von f_{MF} : Bei der alternativen Ableitung der Molekularnäherung ersetzt man in der Energie die Wechselwirkung eines Spins mit seinen nächsten Nachbarn durch eine mittlere Wechselwirkung mit allen Spins,

$$J_{xy} \longrightarrow \frac{1}{V} \sum_y J_{xy} = \frac{\tilde{J}}{V}. \quad (7.18)$$

Wegen der Translationsinvarianz auf dem Gitter hängt \tilde{J} nicht vom Punkt x ab. In dieser Näherung vereinfacht sich der Ausdruck für die Energie wie folgt,

$$H \longrightarrow H_{\text{MFA}} = -V \left\{ \frac{1}{2} \tilde{J} m^2(s) + hm(s) \right\}, \quad m(s) = \frac{1}{V} \sum s_x. \quad (7.19)$$

Für das Isingmodell sind die Werte für das mittlere Feld $m(s)$ aus der Menge

$$M = \left\{ -1, -1 + \delta, -1 + 2\delta, \dots, 1 - \delta, 1 \right\}, \quad \delta = \frac{2}{V}.$$

Für ein mittleres Feld $m \in M$ zeigen $\frac{1}{2}V(1+m)$ Spins nach 'oben' und $\frac{1}{2}V(1-m)$ Spins nach 'unten'. Also gibt es zu jedem Wert von $m \in M$ genau

$$d(m) = \frac{V!}{\left[\frac{1}{2}V(1+m)\right]! \left[\frac{1}{2}V(1-m)\right]!} \quad (7.20)$$

Spinkonfigurationen $w = \{s\}$. Nach der Stirlingschen Formel ist

$$\log(n!) = n(\log n - 1) + o(n),$$

und wir finden für die Zustandssumme die Näherungsformel

$$Z_{\text{MF}} = \sum_{m \in M} d(m) e^{-\beta H_{\text{MF}}(m)} = \sum_m e^{-\beta V f_{\text{MF}}(m)} \quad (7.21)$$

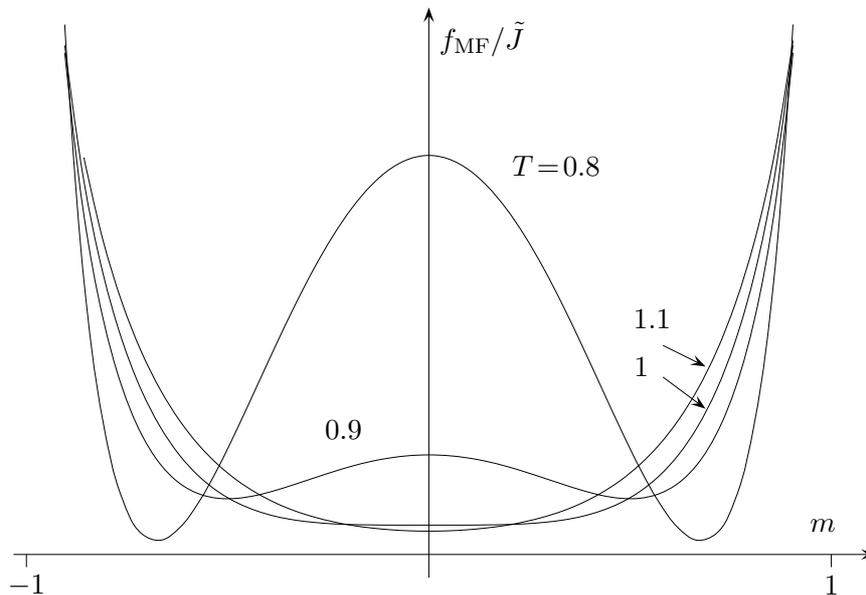
mit der freien Energiedichte (7.17), bis auf Korrekturterme der Ordnung $o(V)/V$. Im thermodynamischen Grenzfall verschwinden diese Korrekturterme und m wird zu einem kontinuierlichen Feld mit Werten im Intervall $[-1, 1]$. Diese zweite Ableitung der MFA macht deutlich, dass

$$P_{\text{MF}}(m) = \frac{1}{Z_{\text{MF}}} e^{-\beta V f_{\text{MF}}(m)} \quad (7.22)$$

die Wahrscheinlichkeitsverteilung für das Auffinden des mittleren Feldes m in der Molekularfeldnäherung ist. Für große Volumen zeigt diese Verteilung ausgeprägte Maxima bei den Minimas der freien Energiedichte.

In der folgenden Abbildung ist f_{MF}/\tilde{J} für verschwindendes Magnetfeld und verschiedene Temperaturen geplottet. Für $T < T_c = \tilde{J}$ hat f_{MF} ein Maximum am Ursprung und zwei Minima bei $\pm m_0$, für $T > T_c$ ein globales Minimum am Ursprung. Die Werte des Potentials an den Endpunkten und am Ursprung sind

$$f_{\text{MF}}(h = 0, m = 0) = -T \log 2 \quad \text{und} \quad f_{\text{MF}}(h = 0, m = 1) = -dJ.$$



Die freie Energiedichte $f_{\text{MF}}(m)$ in (7.17) ist minimal für die Lösung m_0 der *Gapgleichung*

$$\tilde{J}m_0 + h = \frac{1}{2\beta} \log \frac{1 + m_0}{1 - m_0} \implies m_0 = \tanh(\beta\tilde{J}m_0 + \beta h). \quad (7.23)$$

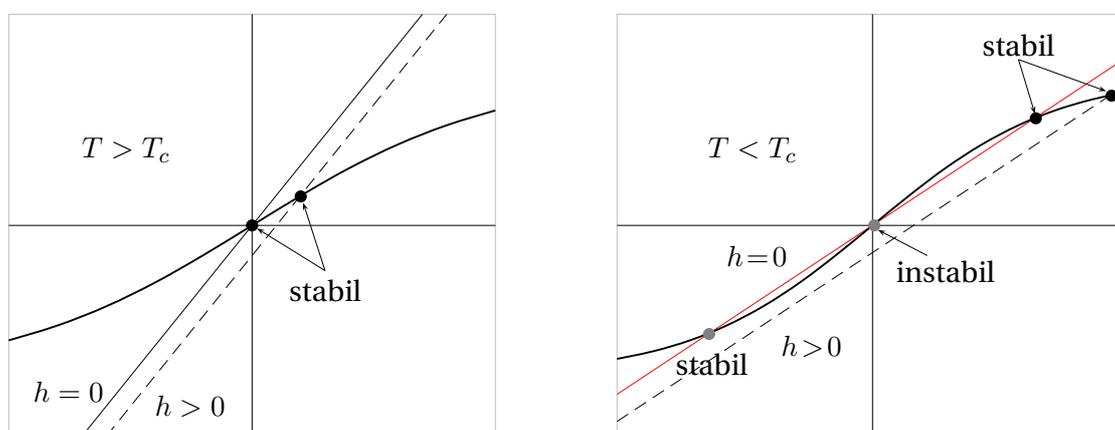
In dieser transzendenten *Selbstkonsistenzgleichung* für das mittlere Feld setzen wir

$x = \beta \tilde{J} m_0 + \beta h$. Die Bestimmungsgleichung für x hat die Form

$$\frac{1}{\tilde{J}}(Tx - h) = \tanh x. \quad (7.24)$$

Sie besitzt eine eindeutige Lösung wenn die Steigung T/\tilde{J} der linearen Funktion auf der linken Seite größer oder gleich der Steigung der \tanh -Funktion auf der rechten Seite ist, also wenn gilt

$$T > T_c = \tilde{J} = 2dJ. \quad (7.25)$$



Oberhalb der kritischen Temperatur strebt die Lösung $m_0(h)$ für $h \rightarrow 0$ gegen Null und die Suszeptibilität

$$\chi = \left(\frac{\partial m_0}{\partial h} \right) \Big|_{h=0} \quad (7.26)$$

folgt mit (7.23) dem *Curie-Weisschen Gesetz*,

$$\chi \stackrel{m_0(0)=0}{=} \beta(\tilde{J}\chi + 1) \implies \chi = \frac{1}{T - T_c}. \quad (7.27)$$

Es ist Brauch, die dimensionslose Temperaturdifferenz einzuführen,

$$\epsilon = \frac{T_c - T}{T_c}. \quad (7.28)$$

Die Divergenz der Suszeptibilität in der Nähe des kritischen Punktes bei T_c (für $T \downarrow T_c$

oder $T \uparrow T_c$) ist

$$\chi \sim |\epsilon|^{-\gamma}. \quad (7.29)$$

In der Molekularfeldnäherung ist der *kritische Exponent* γ gleich 1.

Unterhalb der kritischen Temperatur und für $h > 0$ ist $m_0(h)$ die größte der drei Lösungen der Gapgleichung (7.23). Für $h \downarrow 0$ ergibt sich eine spontane Magnetisierung $m_0(T) > 0$. In der Nähe der kritischen Temperatur strebt m_0 gegen Null und wir können $\tanh \beta \tilde{J} m$ in der Formel (7.23) mit $h = 0$ in eine Potenzreihe entwickeln,

$$m_0 = \beta \tilde{J} m_0 - \frac{1}{3} (\beta \tilde{J} m_0)^3 + \dots$$

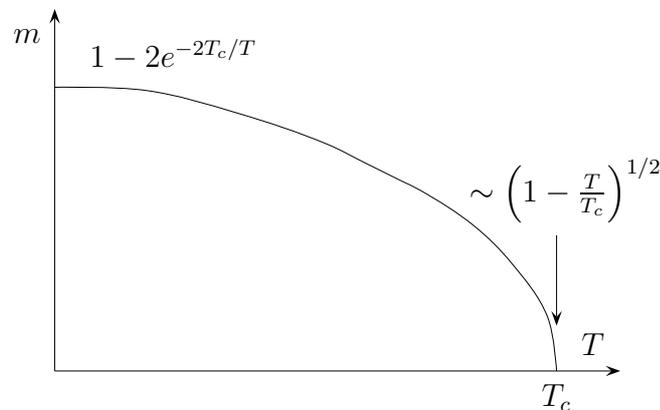
Diese Gleichung hat wie erwartet drei Lösungen,

$$m_0 = 0 \quad \text{und} \quad m_0 = \pm \left(\frac{1}{\beta \tilde{J}} \right)^{3/2} \sqrt{3} (\beta \tilde{J} - 1)^{1/2}. \quad (7.30)$$

Die erste Lösung gehört zum ungeordneten paramagnetischen Hochtemperaturzustand und die beiden anderen Lösungen zu den geordneten ferromagnetischen Tieftemperaturzuständen. Für $T < T_c = \tilde{J}$ haben die geordneten Zustände minimale freie Energiedichte. Die Temperaturabhängigkeit der spontanen Magnetisierung ist in der folgenden Figure gezeigt. Sie verschwindet für $T \uparrow T_c$ gemäß

$$m_0(T) = \sqrt{3} \frac{T}{T_c} \epsilon^{1/2}. \quad (7.31)$$

Die spontane Magnetisierung ist ein *Ordnungsparameter* für das System, da $m_0 \neq 0$ bedeutet, daß das System geordnet ist und $m_0 = 0$, daß es ungeordnet ist.



Der Exponent für das asymptotische Potenzgesetz des Ordnungsparameters ist β , so

daß im Allgemeinen

$$m_0(T) \sim \epsilon^\beta. \quad (7.32)$$

Die Vorhersage der MFA für den kritischen Exponenten¹ β ist $\frac{1}{2}$. In der Molekularfeldnäherung springt die *spezifische Wärme* bei T_c von einem endlichen Wert unterhalb T_c auf 0 oberhalb T_c . Die Höhe des Sprungs ist $3k/2$.

Die Magnetisierung als Funktion des Magnetfeldes h folgt aus der Selbstkonsistenzgleichung (7.23) wenn wir die rechte Seite dieser Gleichung für $T = T_c$ bis zur dritten Ordnung in h entwickeln,

$$m_0 = m_0 + \beta_c h - \frac{1}{3}(m_0 + \beta_c h)^3 + \dots \quad (7.33)$$

Für sehr kleine m_0 und h dürfen wir $\beta_c h \ll m_0$ annehmen. Dann finden wir

$$m_0 \sim (3\beta_c h)^{1/3}, \quad (T = T_c), \quad (7.34)$$

was mit unserer Annahme verträglich ist. Im Allgemeinen hat man

$$m_0 \sim h^{1/\delta} \quad \text{für} \quad T = T_c. \quad (7.35)$$

In der Molekularfeldnäherung ist $\delta = 3$.

Schlußendlich vergleichen wir die Resultate der MFA in der Nähe des Phasenübergangs mit exakten Resultaten. Die Tatsache, dass das MFA-Resultat für T_c nur von der Anzahl Nachbarn q über

$$\tilde{J} = qJ \quad (7.36)$$

abhängt, und nicht von der Dimension des Gitters, ist eine der großen Schwächen der Näherung. Die einfache MFA sagt für das eindimensionale Isingmodell einen Phasenübergang bei $T_c > 0$ voraus, und dies ist offensichtlich inkorrekt. In der folgenden Tabelle werden die MFA-Werte für T_c mit den best-bekanntesten Werten für T_c für 2- und 3-dimensionale Gitter verglichen. In jeder Dimension wird die Vorhersage der MFA

¹Nicht mit der inversen Temperatur verwechseln!

besser wenn die Anzahl nächster Nachbarn (die Koordinationszahl) zunimmt.

Gitter	d	q	$T_{c,\text{MF}}/T_c$	$T_c/T_{c,\text{MF}}$
Quadrat	2	4	1.763	0.567
Dreieck	2	6	1.648	0.607
einfach kubisch	3	4	1.330	0.752
bcc	3	8	1.260	0.794
fcc	3	12	1.225	0.816

(7.37)

Eine weitere Vorhersage ist, dass in der Nähe der kritischen Temperatur die verschiedenen thermodynamischen Größen ein Potenzverhalten zeigen. In der MFA sind die kritischen Exponenten $\beta = 1/2$, $\gamma = 1$ und $\delta = 3$ unabhängig von der Dimension. Sie stimmen nicht mit den exakten kritischen Exponenten der Onsagersche Lösung für das 2-dimensionale Isingmodell überein. Weiterhin macht in der MFA die spezifische Wärme einen Sprung bei T_c , im Gegensatz zur Onsager-Lösung, in der sie eine logarithmische Singularität am kritischen Punkt hat. Ähnliche Diskrepanzen findet man in 3 Dimensionen. Aber in 4 und mehr Dimensionen sind die kritischen Exponenten der MFA korrekt. In der folgenden Tabelle sind die wichtigsten Exponenten für das Isingmodell tabelliert.

Größe	Exponent	d=2 (exakt)	d=3	MFA
spezifische Wärme	α	0 (logar.)	0.113	0 (Sprung)
Ordnungsparameter	β	1/8	0.324	1/2
Suszeptibilität	γ	7/4	1.238	1
Zustandsgleichung	δ	15	4.82	3
	η	1/4	0.031(5)	0
Korrelationslänge	ν	1	0.629(4)	1/2
Potenzgesetz bei T_c	η	0	1/4	0.04

Wir fassen zusammen:

- Die Dimension geht in der MFA verloren. Der einzige d -abhängige Parameter ist \tilde{J} .
- Die Art des Phasenübergangs wird für $d \geq 2$ richtig und $d = 1$ falsch vorausgesagt.

- Für $d \geq 2$ ist die kritische Temperatur der MFA zu hoch und das kritische Verhalten (die Art der Singularität bei $T = T_c$ und $h = 0$) wird inkorrekt wiedergegeben.
- Die MFA zeigt nicht, dass kurzreichweitige Wechselwirkungen zu langreichweitigen Korrelationen führen können.

7.2 MFA für Gitterfeldtheorien

Im vorherigen Abschnitt haben wir die Molekularfeldnäherung für das freie Energiefunktional von Spinmodellen bestimmt. Nun übertragen wir die Ergebnisse um die Molekularfeldnäherung für die effektive Wirkung $\Gamma[\varphi]$ zu gewinnen. Dazu lässt man bei der Minimierung in (6.48) nur Produktmasse zu,

$$d\mu(\phi) = \prod_x d\nu_x(\phi_x), \quad d\nu_x(\phi) = p_x(\phi)d\mu(\phi), \quad (7.38)$$

die folgende Nebenbedingung erfüllen,

$$\int d\nu_x(\phi)\phi = \varphi_x. \quad (7.39)$$

Um fortzufahren setzen wir die Standard-Wirkung für das Skalarfeld voraus,

$$S[\phi] = \frac{1}{2} \sum_x (\nabla\phi_x)^2 + \sum_x V(\phi_x). \quad (7.40)$$

Mit Berücksichtigung der Nebenbedingung (7.39) findet man für die gemittelte Wirkung

$$\int d\nu(\phi)S[\phi] = \frac{1}{2} \sum_x (\nabla\varphi_x)^2 + \sum_x \int d\nu_x(\phi) V(\varphi_x, \phi), \quad (7.41)$$

wobei wir das verschobene Potential

$$V(\varphi, \phi) = d(\varphi - \phi)^2 + V(\phi). \quad (7.42)$$

mit $V(\phi, \phi) = V(\phi)$ einführen. Eine ähnliche Rechnung wie für die Spinmodelle führt auf folgende Molekularfeldnäherung für die effektive Wirkung,

$$\Gamma_{\text{MF}}[\varphi] = \frac{1}{2} \sum_x (\nabla\varphi_x)^2 + \sum_x u_{\text{MF}}(\varphi_x). \quad (7.43)$$

Das effektive Potential u_{MF} ist bis auf den additiven Term $-d\varphi^2$ gleich der Legendre Transformierten von $\log z_0(j)$, wobei $z_0(j)$ die Laplace-Transformierte von $d\phi^2 + V(\phi)$ ist,

$$u_{\text{MF}}(\varphi) = -d\varphi^2 + (\mathcal{L}w_0)(\varphi) \quad \text{mit} \quad z_0(j) = e^{w_0(j)} = \log \int d\mu(\phi) e^{j\phi - d\phi^2 - V(\phi)}. \quad (7.44)$$

Für ein translationsinvarianten System mit ferromagnetischer Kopplung wird φ_x ortsunabhängig sein. Für ein homogenes φ ist die effektive Wirkung proportional zur Größe des Gitters βV und zum *effektiven Potential* u_{MF} in der Molekularfeldapproximation,

$$\Gamma_{\text{MF}}[\varphi] = \beta V u_{\text{MF}}(\varphi), \quad \varphi_x = \varphi. \quad (7.45)$$

Man kann zeigen, dass u_{MF} auch die Molekularfeldapproximation für das *constraint effective potential* [58] ist, und deshalb ist

$$dP_{\text{MF}}(\varphi) = \frac{1}{Z_{\text{MF}}} e^{-\beta V u_{\text{MF}}(\varphi)} d\mu(\varphi) \quad (7.46)$$

die Wahrscheinlichkeitsverteilung für das Auffinden des mittleren konstanten Feldes φ in der Molekularfeldnäherung, siehe [63]. Da u_{MF} das konvexe effektive Potential u nach oben beschränkt, ist seine konvexe Hülle

$$(\mathcal{L}^2 u_{\text{MF}})(\varphi) \geq u(\varphi) \quad (7.47)$$

eine noch bessere Approximation für $u(\varphi)$. Diese verbesserte Approximation heisst *Maxwell-Konstruktion*.

Für die freie Theorie mit Potential $V(\phi) = \frac{1}{2}m^2\phi^2$ ist bis auf eine additive Konstante

$$w_0(j) = \frac{1}{2} \frac{j^2}{m_d^2} \Rightarrow (\mathcal{L}w_0)(\varphi) = \frac{1}{2} m_d^2 \varphi^2, \quad m_d^2 = m^2 + 2d,$$

und deshalb ist das effektive Potential gleich dem klassischen Potential, $u_{\text{MF}}(\varphi) = V(\varphi)$. Für eine wechselwirkende ϕ^4 -Theorie mit Potential

$$V(\phi) = \frac{m^2}{2} \phi^2 + \frac{\lambda}{4} \phi^4 \quad (7.48)$$

lautet die strikt konvexe „Schwinger-Funktion“

$$w_0(j) = \log \int d\phi \exp \left(j\phi - \frac{m_d^2}{2}\phi^2 - \frac{\lambda}{4}\phi^4 \right). \quad (7.49)$$

Für die Lokalisierung eines Phasenübergangs im Raum der Parameter (m, λ) bestimmen wir die zweite Ableitung von $w_0(j)$ am Ursprung,

$$w_0''(0) = \frac{4z}{m_d^2} \frac{K_{3/4}(z) - K_{1/4}(z)}{K_{1/4}(z)}, \quad z = \frac{m_d^4}{8\lambda}. \quad (7.50)$$

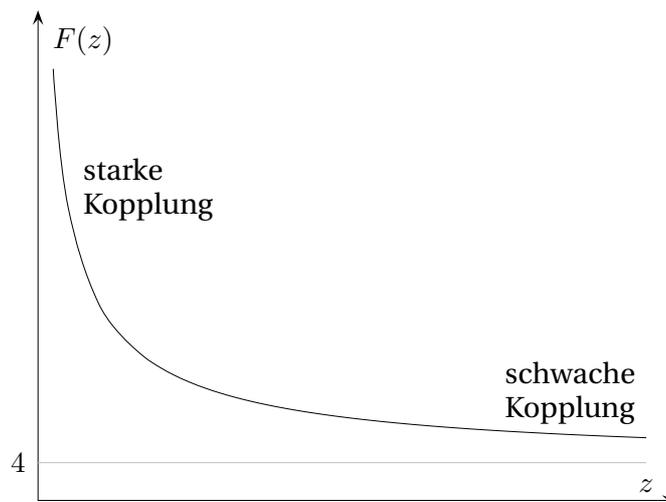
Für das \mathbb{Z}_2 -symmetrische Potential (7.48) hat das ebenfalls symmetrische $w_0(j)$ seinen Minimum am Ursprung und $\varphi(j=0) = 0$. Nach (5.59) ist die Krümmung von $\mathcal{L}w_0$ am Ursprung gleich

$$(\mathcal{L}w_0)''(0) = \frac{1}{w_0''(0)} \quad (7.51)$$

Deshalb ändert das Vorzeichen der Krümmung von u_{MF} in (7.44) am Ursprung für

$$2d = \frac{m_d^2}{4z} \frac{K_{1/4}(z)}{K_{3/4}(z) - K_{1/4}(z)} \iff \frac{8d}{m_d^2} = \frac{1}{z} \frac{K_{1/4}(z)}{K_{3/4}(z) - K_{1/4}(z)} \equiv F(z). \quad (7.52)$$

Die Funktion $F(z)$ ist in der folgenden Abbildung geplottet. Für positive z nimmt sie monoton ab und strebt für große z gegen 4. Daraus folgt, dass (7.52) nur für $m^2 < 0$ eine Lösung besitzt. Für $z \rightarrow 0$ strebt $F(z)$ gegen positiv Unendlich. Also gibt es für jedes $m^2 < 0$ eine Lösung $\lambda(m^2)$ dieser Gleichung.



Für schwach gekoppelte Systeme ist $z \gg 1$ und wir dürfen die asymptotischen Ent-

wicklungen der Kelvin-Funktionen K_ν benutzen. Dann vereinfacht sich (7.52) zu

$$-\frac{m^2}{2d} = \frac{3}{8z} - \frac{3}{8z^2} + \dots = \frac{3\lambda}{m_d^4} \left(1 - \frac{8\lambda}{m_d^4} + \dots \right). \quad (7.53)$$

Vernachlässigen wir auf der rechten Seite Terme der Ordnung $O(\lambda^3)$, dann hat diese Gleichung die beiden Lösungen

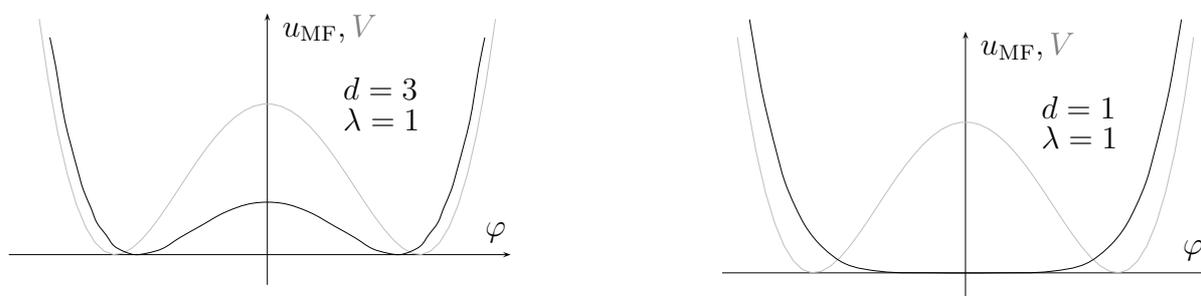
$$\lambda(m) = \left(\frac{2d + m^2}{4} \right)^2 \left(1 \pm \sqrt{1 + \frac{16m^2}{3d}} \right). \quad (7.54)$$

Nur für das negative Vorzeichen der Wurzel verschwindet, wie erwartet, die „kritische Masse“ für $\lambda = 0$. Für diese Lösung ist m^2 negativ für positives λ .

In den folgenden Abbildungen sind das effektive Potential u_{MF} und das klassischen Potential

$$V(\phi) = \lambda(\phi^2 - 1)^2, \quad (7.55)$$

für verschiedene Werte von λ abgebildet. Der Graph von $V(\phi)$ ist in grau, derjenige von u_{MF} in schwarz geplottet. Das octave-Programm zur Berechnung von u_{MF} findet sich im Anhang zu diesem Kapitel.

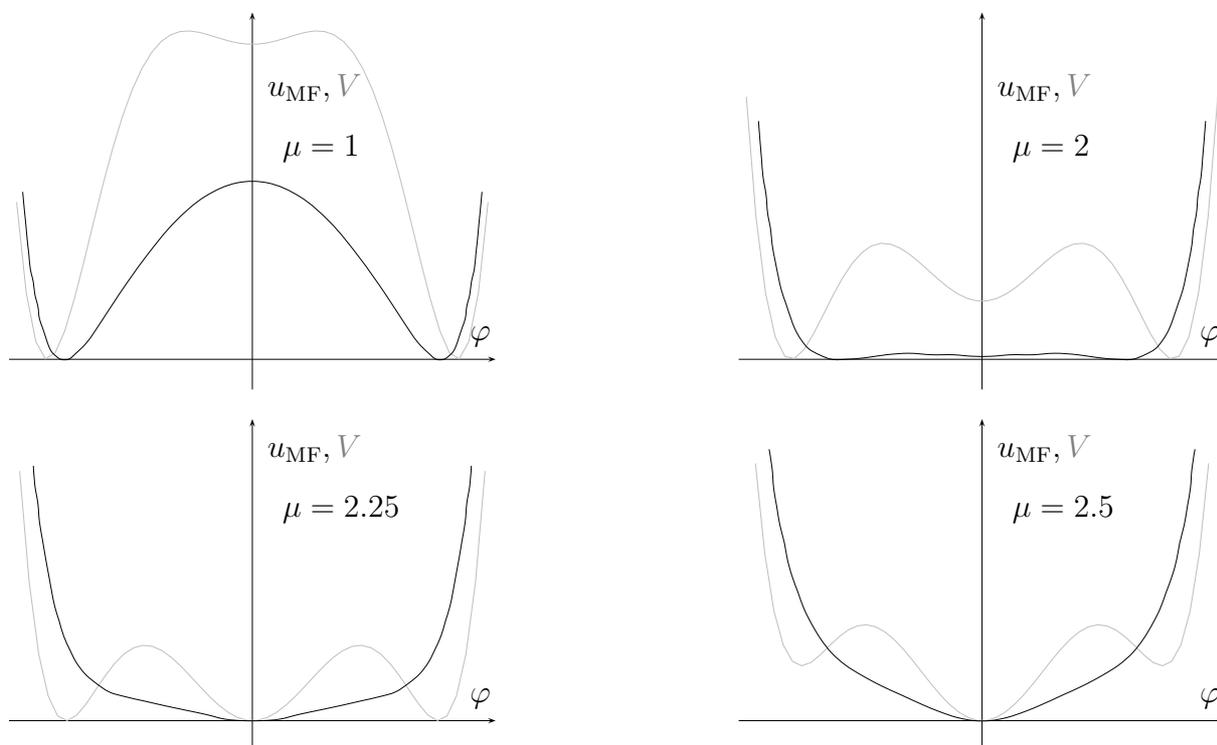


Mit zunehmender Dimension liegen die Minimas des nicht-konvexen u_{MF} näher an den Minimas des klassischen Potentials.

In den folgenden Abbildungen sind das \mathbb{Z}_2 -symmetrische klassische Potential

$$V(\phi) = \phi^6 - 3\phi^4 + \mu\phi^2 \quad (7.56)$$

und das effektive Potential u_{MF} in 3 Dimensionen für verschiedene Werte von μ geplottet.



Das System zeigt in der Molekularfeldnäherung einen Phasenübergang schwach erster Ordnung. Für μ etwa kleiner 2 liegt eine gebrochene Phase vor. Für $\mu \approx 2$ springt der Ordnungsparameter auf den Wert 0.

7.3 Programme zu Kapitel 7

Mit dem folgende octave-Programm `mfscalar.m` wurde das effektive Potential u_{MF} in der Molekularfeldnäherung für das klassische Potential

$$V(\phi) = \lambda(\phi^2 - 1)^2 \quad (7.57)$$

berechnet. Einige Plots finden sich auf der Seite 130. Die Dimension d der Raumzeit kann im Quellcode geändert werden.

```
function mfscalar;
# berechnet das effektive Potential fuer Skalarfeldtheorie
# mit V(phi)=lam*(phi**2-1)**2 in der Molekularfeldnaeherung.
# Dimension d und Kopplung lam in Quellcode eingeben!
# Speicherung in mfscalar.dat
#
d=3; # Dimension
lam=input("lambda_");
a=(d-2*lam);
closeplot;
```

```

Nx=501; eps=2/(Nx-1); # Nx Stuetzstellen : ungerade!
x=linspace(-10,10,Nx); x2=x.*x; x4=x2.*x2; eps=eps/3;
z=eps*exp(-a*x2-lam*x4-lam);
j=linspace(-20,20,80)'; N=length(j);
#_Fuer_Simpson_Integration;
for_i=2:2:Nx-1;
    _z(i)=4*z(i);
endfor;
for_i=3:2:Nx-2;
    _z(i)=2*z(i);
endfor;
int0=zeros(N,Nx); int1=int2=int0;
L=zeros(N,1); s0=s1=umf=umfl=L;
for_i=1:N
    _int0(i,:)=z.*exp(j(i)*x);
    _s0(i)=sum(int0(i,:));
    _int1(i,:)=x.*int0(i,:);
    _s1(i)=sum(int1(i,:));
endfor;
#_Schwingerfunktion
w0=log(s0);
L=s1./s0;
#_effektives_Potential_berechnen,_plotten_und_speichern
umf=-d*L.*L+j.*L-w0;
#_Minimum_suchen_und_Potential_zu_normieren
[ min1 , nmin ]=min(umf); #_Minimum_von_u
nmin=max(nmin,N+1-nmin);
umf(nmin)=umf(nmin)+.5; #_Markierung_des_Minimums
data=[L,umf-min1]; #_Minimum_von_u_auf_0_setzen
#_klassisches_Potential
L2=L.*L;
V=lam*L2.*L2-2*lam*L2+lam;
[ vmin1 , vnmin ]=min(V);
datav=[L,V-vmin1];
gplot([-1.5:1.5],data,datav);
mfscalar=fopen("mfscalar.dat","w","native");
for_i=1:N
    fprintf(mfscalar,"%4.2f,%4.2f",L(i),umf(i)-min1);
    if_(rem(i,5)==0)_fprintf(mfscalar,"\n");
endif;
endfor;
fclose(mfscalar);
endfunction;

```

7.4 Aufgaben

Aufgabe 13: Molekularfeldnäherung des \mathbb{Z}_3 -Modells

Gegeben ist die Hamiltonfunktion

$$H = - \sum_{x,y \in \Lambda} J_{xy} \cos(\theta_x - \theta_y) \quad \text{mit} \quad \theta_x \in \left\{ \frac{2\pi k}{3} \mid k = 0, 1, 2 \right\} .$$

Bestimmen Sie die Zustandssumme $Z = \sum_{\omega \in \Omega} \exp(-\beta H(\omega))$ in der Molekularfeldnäherung. Führen Sie als Ordnungsparameter

$$m = \frac{1}{V} \sum_{x \in \Lambda} \exp(i\theta_x)$$

ein und drücken Sie die Hamiltonfunktion durch m und \bar{m} aus. Wieviele Konfigurationen gibt es für ein vorgegebenes m ? Geben Sie $f(m, \bar{m})$ in

$$Z = \sum_m \exp(-\beta V f(m, \bar{m}))$$

an und diskutieren Sie das Ergebnis.

Hinweis: Führen Sie a_0, a_1, a_2 ein, wobei a_k die Anzahl der Gitterplätze mit $\theta = \frac{2\pi k}{3}$ ist. Drücken Sie m durch die a_k aus. Sind für ein fixiertes m und $V = |\Lambda|$ die a_k eindeutig bestimmt? Benutzen Sie die a_k um die Anzahl der Konfigurationen zu bestimmen. Führen Sie als Ordnungsparameter

$$m = \frac{1}{V} \sum_{x \in \Lambda} \exp(i\theta_x)$$

ein und drücken Sie die Hamiltonfunktion durch m und \bar{m} aus. Wieviele Konfigurationen gibt es für ein vorgegebenes m ? Geben Sie $f(m, \bar{m})$ in

$$Z = \sum_m \exp(-\beta V f(m, \bar{m}))$$

an und diskutieren Sie das Ergebnis.

Kapitel 8

Transfermatrizen

In den Kapiteln 2 und 5 haben wir klassische Feldtheorien in $d - 1$ Raumdimensionen über den Funktionalintegralformalismus quantisiert und sind durch die analytische Fortsetzung der Vakuumerwartungswerte zur euklidischen Formulierung der quantisierten Systeme gelangt. Diese hatte die Interpretation eines klassischen statistischen Systems in d Dimensionen. Die Diskretisierung der Funktionalintegrale führte uns schließlich zu den Gittertheorien. In diesem Kapitel gehen wir teilweise den umgekehrten Weg. Ausgehend von einer Gittertheorie soll ein Zustandsraum und ein Hamilton-Operator konstruiert werden, der im Kontinuums limites gegen den Hamilton-Operator der ursprünglichen Theorie konvergiert. Der Formalismus zeigt den Übergang vom Gittermodell zur entsprechenden Quantenfeldtheorie. Die dabei vorgestellte Transfermatrix-Methode ist in Gitterfeldtheorien und Spinmodellen gleichermaßen einsetzbar. Dies wird im vorliegenden Kapitel anhand einfacher eindimensionaler Spinmodelle, auch Spinketten genannt, und Skalarfeldtheorien illustriert.

8.1 Ising-Kette

Wir werden zunächst die Transfermatrix über die einfache Isingkette einführen. Anschließend wird der Transfermatrix-Formalismus allgemein behandelt. In seiner Dissertation untersuchte ERNST ISING 1928 die lineare Kette von magnetischen Momenten oder „Spins“ [38]. Ising-spins können, wie in der folgenden Abbildung gezeigt, durch in zwei entgegengesetzte Richtungen zeigende Vektoren dargestellt werden.

$$\begin{array}{cccccccccccccccc} s_x : & \uparrow & \uparrow & \uparrow & \downarrow & \downarrow & \uparrow & \uparrow & \uparrow & \uparrow & \downarrow & \downarrow & \downarrow & \uparrow & \uparrow & \uparrow \\ x : & 1 & 2 & 3 & & & & & & & & & & & & N \end{array}$$

Wir betrachten ein *eindimensionales* endliches Gitter $\Lambda \subset \mathbb{Z}$ bestehend aus N Gitterpunkten. Auf jedem Gitterpunkt x lebt ein Spin $s_x \in \{\uparrow, \downarrow\}$ oder $s_x \in \{1, -1\}$. Ein Zustand des Systems wird spezifiziert durch eine Konfiguration $w = \{s_1, \dots, s_N\}$. Wir wählen periodische Randbedingungen, so dass 1 und N nächste Nachbarn sind. Für die Isingkette vereinfacht sich die Energiefunktion (6.2) zu

$$H_\Lambda(w) = -J \sum_{x=1}^N s_x s_{x+1} - h \sum_{x=1}^N s_x. \quad (8.1)$$

Zur Berechnung der Zustandssumme schreiben wir diese wie folgt um,

$$\begin{aligned} Z_\Lambda(\beta) &= \sum_w e^{-\beta H_\Lambda(w)} = \sum_{s_1, \dots, s_N} e^{K s_1 s_2 + \frac{1}{2} \beta h (s_1 + s_2)} \cdot e^{K s_2 s_3 + \frac{1}{2} \beta h (s_2 + s_3)} \dots \\ &= \sum_{s_1, \dots, s_N} T_{s_1 s_2} T_{s_2 s_3} \dots T_{s_N s_1} = \text{tr } T^N, \quad K = \beta J. \end{aligned} \quad (8.2)$$

Hier wurde eine zweidimensionale *Transfermatrix* so definiert, daß ihre Elemente durch

$$\langle s | \hat{T} | s' \rangle = e^{K s s' + \frac{1}{2} \beta h (s + s')} \quad (8.3)$$

gegeben sind, wobei s und s' unabhängig die Werte ± 1 annehmen können. Die explizite Darstellung der *Transfermatrix* lautet

$$\hat{T} = \begin{pmatrix} e^{K+\beta h} & e^{-K} \\ e^{-K} & e^{K-\beta h} \end{pmatrix}. \quad (8.4)$$

Sie ist symmetrisch und positivitätserhaltend, $\hat{T} = \hat{T}^\dagger$ und $T_{ss'} > 0$. Zur weiteren Auswertung diagonalisieren wir \hat{T} mit einer Drehung R ,

$$\hat{T} = R D R^{-1}, \quad R = \begin{pmatrix} \cos \gamma & -\sin \gamma \\ \sin \gamma & \cos \gamma \end{pmatrix}, \quad D = \begin{pmatrix} \lambda_+ & 0 \\ 0 & \lambda_- \end{pmatrix}. \quad (8.5)$$

Die beiden reellen Eigenwerte sind positiv,

$$\lambda_\pm = e^K \left(\cosh \beta h \pm \sqrt{\sinh^2 \beta h + e^{-4K}} \right), \quad (8.6)$$

und λ_+ ist der größere Eigenwert. Der Drehwinkel γ in (8.5) ist bestimmt durch

$$\sin 2\gamma = \frac{e^{-2K}}{\sqrt{\sinh^2 \beta h + e^{-4K}}}, \quad \cos 2\gamma = \frac{\sinh \beta h}{\sqrt{\sinh^2 \beta h + e^{-4K}}}. \quad (8.7)$$

Benutzt man dies im Ausdruck (8.2) für die Zustandssumme dann ergibt sich

$$Z_{\Lambda}(\beta, h) = \text{tr} \hat{T}^N = \lambda_+^N + \lambda_-^N = \lambda_+^N (1 + p^N), \quad p = \frac{\lambda_-}{\lambda_+} < 1. \quad (8.8)$$

Wichtige Größen der Thermodynamik sind damit schon allein durch die Eigenwerte der Transfermatrix bestimmt. Zum Beispiel ist die *freie Energiedichte*

$$f_{\Lambda}(\beta, h) = \frac{1}{N} F_{\Lambda}(\beta, h) = -\frac{1}{\beta} \log \lambda_+ - \frac{1}{\beta N} \log(1 + p^N). \quad (8.9)$$

Im thermodynamischen Limes $N \rightarrow \infty$ strebt p^N gegen Null und f ist proportional zum Logarithmus des größten Eigenwertes der Transfermatrix,

$$\lim_{N \rightarrow \infty} f_{\Lambda}(\beta, h) = f(\beta, h) = -\frac{1}{\beta} \log \lambda_+. \quad (8.10)$$

Die *innere Energiedichte* $u_{\Lambda} = U_{\Lambda}/N$ wird mit (6.29) zu

$$u_{\Lambda}(\beta, h) = -\frac{\partial}{\partial \beta} \left(\log \lambda_+ + \frac{1}{N} \log(1 + p^N) \right). \quad (8.11)$$

Für ein verschwindendes Magnetfeld $h = 0$ oder im thermodynamischen Grenzfall $N \rightarrow \infty$ vereinfacht sich die Formel wie folgt,

$$\begin{aligned} u_{\Lambda}(\beta, 0) &= -\tanh K \left(\frac{1 + (\tanh K)^{N-2}}{1 + (\tanh K)^N} \right) \\ u(\beta, h) &= \lim_{N \rightarrow \infty} u_{\Lambda}(\beta, h) = -\frac{\partial}{\partial \beta} \log \lambda_+. \end{aligned} \quad (8.12)$$

Für die unendlich ausgedehnte Isingkette mit ausgeschaltetem Magnetfeld ist $u(\beta, 0) = -\tan K$. Die Magnetisierung berechnet sich mit Hilfe der Transfermatrix,

$$\begin{aligned} m &= \langle s_1 \rangle = \frac{1}{Z} \sum_w e^{-\beta H} s_1 \\ &= \frac{1}{Z} \sum_w s_1 T_{s_1 s_2} T_{s_2 s_3} \cdots T_{s_N s_1} = \frac{1}{Z} \text{tr} S \hat{T}^N, \end{aligned} \quad (8.13)$$

wobei $S = \sigma_3$ die dritte Pauli-Matrix ist. Wegen $\hat{T} = RDR^{-1}$ und der Zyklizität der Spur erhalten wir

$$m = \frac{1}{Z} \text{tr} (R^{-1} S R D^N) \quad \text{mit} \quad R^{-1} S R = \begin{pmatrix} \cos 2\gamma & -\sin 2\gamma \\ -\sin 2\gamma & -\cos 2\gamma \end{pmatrix}. \quad (8.14)$$

Mit der obigen Form für die diagonalisierte Transfermatrix finden wir das Resultat

$$m = \frac{1 - p^N}{1 + p^N} \cos 2\gamma \xrightarrow{N \rightarrow \infty} \cosh(2\gamma) = \frac{\sinh \beta h}{\sqrt{\sinh^2 \beta h + e^{-4K}}}. \quad (8.15)$$

Nach (6.30) erhält man die Magnetisierung auch durch Ableiten der freien Energiedichte (8.9) nach dem Magnetfeld. Schaltet man das Magnetfeld aus, so verschwindet die Magnetisierung (8.15) für alle positiven Temperaturen. Nur am absoluten Nullpunkt der Temperatur sind (abhängig von der Reihenfolge der Grenzübergänge) alle Spins auch ohne Magnetfeld parallel ausgerichtet. Man kann allgemein beweisen, dass es für *alle* Spinketten mit kurzreichweitiger Wechselwirkung zwischen den Spins keine geordnete Phase bei positiver Temperatur gibt.

Für die 2-Punktsfunktion findet man auf ähnliche Art für $y \geq x$ die Formel

$$\begin{aligned} \langle s_x s_y \rangle &= \frac{1}{Z} \sum_w e^{-\beta H} s_x s_y \\ &= \frac{1}{Z} \sum_{s_1, s_x, s_y} (T^{x-1})_{s_1 s_x} s_x (T^{y-x})_{s_x s_y} s_y (T^{N+1-y})_{s_y s_1} \\ &= \frac{1}{Z} \text{tr} \left(S \hat{T}^{y-x} S \hat{T}^{N-(y-x)} \right) \\ &= \frac{1}{Z} \text{tr} \left((R^{-1} S R) D^{y-x} (R^{-1} S R) D^{N-(y-x)} \right) \end{aligned} \quad (8.16)$$

mit den in (8.5,8.14) eingeführten Matrizen D und $R^{-1} S R$. Eine kurze Rechnung liefert

$$\langle s_x s_y \rangle = \cos^2 2\gamma + \frac{p^{y-x} + p^{N-(y-x)}}{1 + p^N} \sin^2 2\gamma, \quad y \geq x. \quad (8.17)$$

Wegen der Translationsinvarianz auf dem periodischen Gitter und der Symmetrie $\langle s_x s_y \rangle = \langle s_y s_x \rangle$ hängt die Zweipunktsfunktion wie erwartet nur vom Abstand $|y - x|$ von x und y ab. Im thermodynamischen Grenzfall gilt

$$\begin{aligned} \lim_{N \rightarrow \infty} \langle s_x s_y \rangle &= \cos^2 2\gamma + e^{-|y-x|/\xi} \sin^2 2\gamma \\ \text{mit } \xi^{-1} &= \log \frac{1}{p} \xrightarrow{h \rightarrow 0} -\log \tanh K. \end{aligned} \quad (8.18)$$

Für alle positiven Temperaturen ist die Korrelationslänge ξ endlich. Es gilt die *Clustereigenschaft*,

$$\langle s_x s_y \rangle - \underbrace{\langle s_x \rangle \langle s_y \rangle}_{=m^2} \xrightarrow{N \rightarrow \infty} \sin^2 2\gamma e^{-|y-x|/\xi} \xrightarrow{|y-x| \rightarrow \infty} 0. \quad (8.19)$$

Das 1-dimensionale Ising-Modell hat keine geordnete Phase für $T > 0$. Das mag verwunderlich erscheinen, da der Zustand $\uparrow\uparrow\uparrow\uparrow \dots$, d.h. $s_x = 1$ für alle Gitterpunkte x , die niedrigste Energie hat (entartet mit $s_x = -1$ für alle x). Dieser Zustand hat aber nicht die niedrigste *freie Energie* $F = U - TS$. Um dies zu zeigen, betrachten wir eine Konfiguration wie $\uparrow\uparrow\uparrow\uparrow\downarrow\downarrow\downarrow\downarrow$, bei der die Spins teilweise umgedreht sind. Die Trennwand zwischen den beiden Bereichen erhöht die Energie um $\Delta U = 4J$, sie kann aber an N Stellen liegen. Der Entropiegewinn ist $\Delta S = k \log N$. Dies bedeutet, dass bei $T \neq 0$ die freie Energie des Systems durch die Trennwand abgesenkt wird. Später werden wir Modelle in mehr als einer Dimension untersuchen. Dann werden wir Phasenübergänge und spontan gebrochene Phasen bei endlichen Temperaturen finden.

8.1.1 Der „Hamilton-Operator“

Nun gehen wir teilweise den umgekehrten Weg wie in den Kapitel 2 und 5 und extrahieren einen Operator \hat{H} über die Beziehung

$$\hat{T} = e^{-\hat{H}}. \quad (8.20)$$

Da \hat{T} positiv ist, kann \hat{H} hermitesch gewählt werden. Die Matrix \hat{H} ist eine Art diskreter *Hamilton-Operator* für das betrachtete Spinsystem. Für Gitterfeldtheorien sollte er im Kontinuumslimit gegen den Hamilton-Operator der entsprechenden Quantenfeldtheorie streben. Mit Hilfe der Formel

$$\exp \left(\alpha \sum_i n_i \sigma_i \right) = \cosh \alpha + \sinh \alpha \sum_{i=1}^3 n_i \sigma_i, \quad (8.21)$$

wobei σ_i die Pauli-Matrizen sind, lässt sich die Berechnung von \hat{H} geschlossen ausführen. Der Einfachheit halber betrachten wir den Fall $h = 0$, für den die Transfermatrix (8.4) die folgende einfache Form annimmt

$$\hat{T} = e^K \mathbb{1} + e^{-K} \sigma_1 = \frac{e^K}{\cosh K^*} e^{K^* \sigma_1}, \quad K = \beta J. \quad (8.22)$$

Hier haben wir die sogenannte *duale Kopplung* K^* über die Relation

$$\tanh K^* = e^{-2K} \iff \tanh K = e^{-2K^*}. \quad (8.23)$$

eingeführt. Wir erhalten also für den *Hamilton-Operator*

$$\hat{H} = -K + \log \cosh K^* - K^* \sigma_1 = E_0 + K^*(1 - \sigma_1), \quad (8.24)$$

mit Grundzustandsenergie $E_0 = \log \cosh K^* - K - K^*$. Mit Hilfe von (8.22) schreibt sich diese gemäss

$$E_0 = -\log(2 \cosh K) = \beta f(\beta, h = 0). \quad (8.25)$$

Der renormierte Hamilton-Operator \hat{H}' mit der Grundzustandsenergie 0 lautet

$$\hat{H}' = \hat{H} - E_0 = K^*(1 - \sigma_1). \quad (8.26)$$

Der einzige angeregte Energieeigenwert liegt $2K^*$ über dem Grundzustand und bestimmt die Korrelationslänge der Zweipunktfunktion $\langle s_x s_y \rangle$.

8.1.2 Die anti-ferromagnetische Kette

Für $J < 0$ werden Konfigurationen mit antiparallelen benachbarten Spins energetisch begünstigt. Solche Systeme heißen „Anti-Ferromagnete“. Ohne Magnetfeld und für negatives J vereinfachen sich die die Ausdrücke (8.6) für die Eigenwerte der Transfermatrix zu

$$\lambda_+ = 2 \cosh(K) > 0 \quad \text{und} \quad \lambda_- = 2 \sinh(K) < 0 \quad \text{für} \quad J < 0. \quad (8.27)$$

Die Eigenwerte der Transfermatrix sind nicht mehr alle positiv. Die freie Energie, die durch den betragsmäßig maximalen Eigenwert bestimmt wird, ist davon allerdings nicht betroffen. Ohne Magnetfeld ist $\cos(2\gamma) = 0$ und $\sin(2\gamma) = 1$ und die Korrelationsfunktion (8.18) hat die einfache Form

$$\lim_{N \rightarrow \infty} \langle s_x s_y \rangle = (\tanh K)^{|y-x|} = (-1)^{|y-x|} (\tanh |K|)^{|y-x|}. \quad (8.28)$$

Sie hat auf benachbarten Gitterpunkten verschiedene Vorzeichen. Die \hat{T} -Matrix ist nicht mehr durch $\exp(\hat{H})$ mit einer hermiteschen Matrix \hat{H} gegeben, da \hat{T} keine positive Matrix ist. Das langreichweitige Verhalten des Isingmodells lässt sich jedoch

auch durch die Matrix \hat{T}^2 beschreiben. Dies ist eine positive Matrix und wir können

$$\hat{H} = -\frac{1}{2} \log \hat{T}^2 \quad (8.29)$$

definieren. \hat{H} ist identisch zum Hamilton-Operator der gewöhnlichen Isingkette.

8.2 Potts-kette

Eine Konfiguration $w = \{\sigma_1, \dots, \sigma_N\}$ des eindimensionalen Pottsmodells hat die Energie

$$H_\Lambda(w) = -J \sum_x \delta(\sigma_{x+1}, \sigma_x) - 2h \sum_x \delta(\sigma_x, 1), \quad (8.30)$$

wobei wir periodischen Randbedingungen wählen. Bei der Berechnung der Zustandssumme

$$Z_\Lambda(\beta, J, h) = \sum_w e^{-\beta H(w)} \quad (8.31)$$

machen wir Gebrauch von der Transfermatrix-Methode. Eine Wahl für diese Matrix ist

$$(T_{\sigma\sigma'}) = \langle \sigma | \hat{T} | \sigma' \rangle = \begin{pmatrix} \zeta z & z & \dots & z \\ 1 & \zeta & \dots & 1 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 1 & 1 & \dots & \zeta \end{pmatrix}, \quad \zeta = e^{\beta J}, \quad z = e^{2\beta h}. \quad (8.32)$$

Zur Bestimmung der Eigenwerte berechnen wir das charakteristische Polynom. Dazu ziehen wir die zweite Reihe von $\hat{T} - \lambda \mathbb{1}$ von den darunterliegenden Reihen ab. Danach addieren wir die dritte und alle nachfolgenden Spalten zur zweiten Spalte. Auf diese Weise finden wir

$$\begin{aligned} \det(\hat{T} - \lambda \mathbb{1}) &= \det \begin{pmatrix} \zeta z - \lambda & z(q-1) & z & \dots & z \\ 1 & \zeta + q' - \lambda & 1 & \dots & 1 \\ 0 & 0 & \zeta - 1 - \lambda & \dots & 0 \\ \vdots & & & \ddots & \\ 0 & & 0 & \dots & \zeta - 1 - \lambda \end{pmatrix} \\ &= \{\lambda^2 - (\zeta z + \zeta + q')\lambda + z(\zeta - 1)(\zeta + q - 1)\} \{\zeta - 1 - \lambda\}^{q-2}, \end{aligned}$$

wobei $q' = q - 2$ für das Isingmodell verschwindet. Dies führt auf den q' -fach entarteten Eigenwert $\zeta - 1$ und die einfachen Eigenwerte λ_{\pm} , die Wurzeln der quadratische Gleichung

$$\lambda^2 - (\zeta z + \zeta + q')\lambda + z(\zeta - 1)(\zeta + q - 1) = 0. \quad (8.33)$$

Es ergibt sich der folgende explizite Ausdruck für die Zustandssumme

$$Z_{\Lambda}(\zeta, z) = \text{tr } \hat{T}^N = \lambda_+^N + \lambda_-^N + q'(\zeta - 1)^N, \quad (8.34)$$

mit den Eigenwerten der Transfermatrix

$$\begin{aligned} \lambda_{\pm} &= \frac{1}{2} \left((z + 1)\zeta + q' \pm \sqrt{(\zeta z - \zeta - q')^2 + 4(q - 1)z} \right) \\ &= e^{\beta h} \left(e^{\beta J} \cosh \beta h + q' e^{-\beta h} \pm \sqrt{(e^{\beta J} \sinh \beta h - q' e^{-\beta h})^2 + (q - 1)} \right). \end{aligned} \quad (8.35)$$

Für $q = 2$ verschwindet q' und die Zustandssumme ist proportional zu derjenigen des Isingmodells. Im thermodynamischen Grenzfall $N \rightarrow \infty$ werden die thermodynamischen Potentiale von dem größten Eigenwert λ_+ der Transfermatrix bestimmt. Zum Beispiel finden wir für die freie Energiedichte der Potts-kette mit q -wertiger Gittervariablen,

$$\begin{aligned} f(\beta J, \beta h) &= \beta(J + h) + \log \left(\cosh \beta h + q' e^{-\beta(J+h)} \right. \\ &\quad \left. + \sqrt{(\sinh \beta h - q' e^{-\beta(J+h)})^2 + (q - 1)e^{-2\beta J}} \right). \end{aligned} \quad (8.36)$$

8.3 Der allgemeine Formalismus

Der Transfermatrix-Formalismus lässt sich auf Spinsysteme übertragen deren Gitter die Form $\Lambda = \mathbb{Z} \times \mathcal{R}$ hat. Die durch \mathbb{Z} durchnummerierte Koordinate heißt manchmal „Zeit“-Richtung, der Teil \mathcal{R} „räumliches“ Gitter. Sei x eine Durchnummerierung der Punkte von \mathcal{R} , so kennzeichnet $x = (\tau, \mathbf{x})$ mit $\tau \in \mathbb{Z}$ einen Punkt im gesamten Gitter. Eine Spinkonfiguration auf Λ kann als die Menge von Spinkonfigurationen auf dem räumlichen Gitter angesehen werden,

$$w = \{s_x | x \in \Lambda = \mathbb{Z} \times \mathcal{R}\} = \{\mathbf{w}_\tau | \tau \in \mathbb{Z}\}, \quad \text{mit} \quad \mathbf{w}_\tau = \{s_{\tau, \mathbf{x}} | \mathbf{x} \in \mathcal{R}\}. \quad (8.37)$$

Bei einem d -dimensionalen hyperkubischen Gitter Λ ist \mathcal{R} ein $d - 1$ -dimensionales hyperkubisches Gitter. Auf diesen Fall wollen wir uns im Folgenden beschränken.

Wir konstruieren zunächst den „Hilbert-Raum“ der Zustände auf dem räumli-

chen Gitter, wobei wie früher \mathcal{T} der Targetraum der möglichen lokalen Zustände an einem Punkt bezeichnet. Für das Isingmodell ist $\mathcal{T} = \mathbb{Z}_2$ und bei einem ungeladenen Skalarfeld ist $\mathcal{T} = \mathbb{R}$. Nun definieren wir \mathcal{H}_x als den Vektorraum der komplexwertigen Funktionen über den lokalen Zuständen,

$$\mathcal{H}_x = \{\psi | \psi : \mathcal{T} \rightarrow \mathbb{C}\}. \quad (8.38)$$

Die lokalen Zustände $s \in \mathcal{T}$ zeichnen eine mögliche Basis von \mathcal{H}_x aus:

$$|s\rangle = \psi_s \quad \text{mit} \quad \psi_s(s') = \delta_{s,s'}. \quad (8.39)$$

Diese Basis besteht also aus den charakteristischen Funktionen zu den Zuständen. Auf dieser Basis definieren wir das Skalarprodukt

$$\langle s | s' \rangle = \delta_{s,s'}. \quad (8.40)$$

Ist der Targetraum diskret unendlich oder kontinuierlich, dann fordern wir ähnlich wie in der Quantenmechanik $\psi \in \ell_2$ oder $\psi \in L_2(\mathcal{T})$. Beim Isingmodell ist \mathcal{H}_x gleich dem zweidimensionalen Vektorraum \mathbb{C}^2 . Für ein reelles Skalarfeld ist $\mathcal{H}_x = L_2(\mathbb{R})$. Nun definieren wir zu dem räumlichen Gitter einen Zustandsraum

$$\mathcal{H} = \bigotimes_{x \in \mathcal{R}} \mathcal{H}_x. \quad (8.41)$$

Es ist der Raum aller (komplexwertigen) Funktionen über den Konfigurationen (Zuständen) auf \mathcal{R} . Das Skalarprodukt auf \mathcal{H} ist das Produkt der Skalarprodukte in den Faktoren \mathcal{H}_x . Eine mögliche Basis in \mathcal{H} sind die Produktzustände

$$|w\rangle = \bigotimes_{x \in \mathcal{R}} |s_x\rangle. \quad (8.42)$$

Im diskreten Fall sind dies die charakteristischen Funktionen auf einer Konfiguration zu fester „Zeit“ $w = \{s_x | x \in \mathcal{R}\}$. Man bezeichnet diese Basis die „Konfigurationsraumbasis“. Entsprechend der Aufspaltung $\Lambda = \mathbb{Z} \times \mathcal{R}$ des Gitters spalten wir auch die Energiefunktion auf. Dabei setzen wir voraus, dass es nur Wechselwirkungsterme zwischen nächsten Nachbarn gibt,

$$H(w) = \sum_{\tau} H_0(w_{\tau+1}, w_{\tau}) + \sum_{\tau} U(w_{\tau}). \quad (8.43)$$

Der Anteil H_0 enthält die Wechselwirkungsterme zwischen Spins in benachbarten Zeitschichten des Gitters. Er ändert nicht bei Vertauschung der Konfigurationen, $H_0(w', w) =$

$H_0(\mathbf{w}, \mathbf{w}')$. Mit unserer Annahme an die Wechselwirkungsterme gilt

$$H_0 = \sum_{\mathbf{x}} h_0(s_{\tau+1, \mathbf{x}}, s_{\tau, \mathbf{x}}) \quad \text{und} \quad U = \sum_{\langle \mathbf{x}, \mathbf{y} \rangle} u(s_{\tau, \mathbf{x}}, s_{\tau, \mathbf{y}}) \quad (8.44)$$

Wir definieren nun die *Transfermatrix* als linearen Operator auf \mathcal{H} durch seine Matrixelemente in der Konfigurationsraumbasis

$$T_{\mathbf{w}, \mathbf{w}'} = \langle \mathbf{w} | \hat{T} | \mathbf{w}' \rangle = e^{-\beta(H_0(\mathbf{w}, \mathbf{w}') + \frac{1}{2}U(\mathbf{w}) + \frac{1}{2}U(\mathbf{w}'))}. \quad (8.45)$$

Die so definierte Matrix \hat{T} ist reell und symmetrisch und hat reelle Eigenwerte. Die Matrixelemente von \hat{T} sind positiv und nach dem Satz von Frobenius-Perron (siehe nächsten Abschnitt) ist der höchste Eigenwert λ_{\max} von \hat{T} positiv und nicht entartet. Sind nicht alle Eigenwerte λ_n von \hat{T} positiv wie beim Anti-Ferromagneten, dann wählt man die positive Matrix \hat{T}^2 um den *Quantenoperator* \hat{H} der Gittertheorie zu definieren,

$$\hat{T}^2 = e^{-2\hat{H}}, \quad \hat{H} \quad \text{selbstadjungiert.} \quad (8.46)$$

Für die Zustandssumme auf einem periodischen Gitter, welches in Zeitrichtung die Länge N hat, gilt

$$Z_{\Lambda} = \text{tr} \hat{T}^N = \sum_n \lambda_n^N \xrightarrow{N \rightarrow \infty} \lambda_{\max}^N. \quad (8.47)$$

In der Konfigurationsraumbasis können wir in \mathcal{H} einen ausgezeichneten Satz von Operatoren definieren: die Operatoren \hat{s}_x , die in dieser Basis diagonal sind, und die Operatoren $\hat{\pi}_x$, die Basisvektoren in andere Basisvektoren abbilden, beispielsweise

$$\hat{s}_x | \mathbf{w} \rangle = s_x | \mathbf{w} \rangle \quad \text{und} \quad \hat{\pi}_x | \mathbf{w} \rangle = | \mathbf{w}_\delta \rangle. \quad (8.48)$$

Hier geht \mathbf{w}_δ aus \mathbf{w} durch eine Verschiebung von s_x hervor. $\hat{\pi}_x$ entspricht dem exponentierten Impulsoperator der Quantenmechanik, der Ortseigenzustände um eine Konstante verschiebt. Je nach Modell können die $\hat{\pi}_x$ eine andere Bedeutung haben. Für reelle s_x wird es die Addition einer Konstanten sein und für gruppenwertige s_x die Multiplikation mit einem (bei zyklischen Gruppen) generierenden Gruppenelement. Man kann nun jeden Operator auf \mathcal{H} durch die Operatoren \hat{s}_x und $\hat{\pi}_x$ ausdrücken.

Für die Isingkette besteht \mathcal{R} aus einem Punkt. Wählen wir die Basis

$$|1\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \quad \text{und} \quad |-1\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \quad (8.49)$$

dann sind die Matrizen \hat{s} und $\hat{\pi}$ durch

$$\hat{s} = \sigma_3 \quad \text{und} \quad \hat{\pi} = \sigma_1 \quad (8.50)$$

gegeben. Wie bereits bei der Isingkette gezeigt, lassen sich auch Erwartungswerte im Operatorformalismus ausdrücken, beispielsweise

$$\langle s_{\tau, \mathbf{x}} s_{\tau+\Delta, \mathbf{y}} \rangle = \frac{1}{\text{tr} \hat{T}^N} \text{tr} \left(\hat{s}_{\mathbf{x}} \hat{T}^{\Delta} s_{\mathbf{y}} \hat{T}^{N-\Delta} \right) \xrightarrow{N \rightarrow \infty} \lambda_{\max}^{-\Delta} \langle 0 | \hat{s}_{\mathbf{x}} \hat{T}^{\Delta} \hat{s}_{\mathbf{y}} | 0 \rangle. \quad (8.51)$$

Im letzten Schritt haben wir ausgenutzt, dass im Grenzfall $N \rightarrow \infty$ von allen Zuständen nur der Grundzustand $|0\rangle$ von \hat{H} , also der Zustand zum höchsten Eigenwert der Transfermatrix $\hat{T} = \exp(-\hat{H})$ beiträgt.

8.3.1 Transfermatrix für reelles Skalarfeld

Wir betrachten eine nicht-wechselwirkende skalare Gitterfeldtheorie mit Wirkung

$$S = \frac{1}{2} \sum_{\langle x, y \rangle} (\phi_x - \phi_y)^2 + \frac{m^2}{2} \sum_x \phi_x^2. \quad (8.52)$$

Die lokalen Freiheitsgrade sind reelle Felder $\phi_x \in \mathbb{R}$ und der Hilbert-Raum an jedem raumartigen Gitterpunkt ist gleich $L_2(\mathbb{R}) \simeq \{\psi(\phi)\}$. Der Hilbertraum ist entsprechend das Tensorprodukt dieser Räume, über alle Punkte des räumlichen Gitters, $\mathcal{H} = \otimes_{x \in \mathcal{R}} L_2(\mathbb{R})$. Jeder Feldkonfiguration \mathbf{w} auf dem räumlichen Gitter entspricht ein Basisvektor $|\mathbf{w}\rangle$ in der Konfigurationsbasis von \mathcal{H} . Die Transfermatrix ist

$$\langle \mathbf{w} | \hat{T} | \mathbf{w}' \rangle = e^{-E(\mathbf{w}, \mathbf{w}')} \quad (8.53)$$

mit der (symmetrisierten) Energiebeitrag für den Übergang zwischen zwei Raumgittern,

$$\begin{aligned} E(\mathbf{w}, \mathbf{w}') &= \frac{1}{2} \sum_x (\phi_x - \phi'_x)^2 + \frac{m^2}{4} \sum_x (\phi_x^2 + \phi'^2_x) \\ &\quad + \frac{1}{4} \sum_{\langle x, y \rangle} \{(\phi_x - \phi_y)^2 + (\phi'_x - \phi'_y)^2\}. \end{aligned} \quad (8.54)$$

Die diagonalen Operatoren sind die Feldoperatoren,

$$\hat{\phi}_x |\mathbf{w}\rangle = \phi_x |\mathbf{w}\rangle, \quad |\mathbf{w}\rangle = |\{\phi_x | x \in \mathcal{R}\}\rangle \quad (8.55)$$

und die Verschiebungsoperatoren sind die Impulse,

$$\hat{\pi}_{\mathbf{x}} = \frac{1}{i} \frac{\delta}{\delta \phi_{\mathbf{x}}} \implies [\hat{\phi}_{\mathbf{x}}, \hat{\pi}_{\mathbf{y}}] = i\delta(\mathbf{x}, \mathbf{y}). \quad (8.56)$$

Nun kann man wie bei der Isingkette die Transfermatrix durch diese Operatoren ausdrücken. Man erhält mit Hilfe der Identität

$$\langle \mathbf{w} | e^{-K(\hat{\pi})} | \mathbf{w}' \rangle = \frac{1}{(2\pi)^{|\mathcal{R}|/2}} \exp \left\{ -\frac{1}{2} \sum_{\mathbf{x}} (\phi_{\mathbf{x}} - \phi'_{\mathbf{x}})^2 \right\}, \quad (8.57)$$

wobei $K(\hat{\pi}) = \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{x}} \hat{\pi}_{\mathbf{x}}^2$ der kinetische Operator ist, folgende einfache Darstellung für die Matrixelemente der Transfermatrix

$$\langle \mathbf{w} | \hat{T} | \mathbf{w}' \rangle = (2\pi)^{|\mathcal{R}|/2} e^{-F(\hat{\phi})} e^{-K(\hat{\pi})} e^{-F(\hat{\phi})}. \quad (8.58)$$

Hierin tritt der in der Konfigurationsbasis diagonale Operator

$$F(\hat{\phi}) = \frac{1}{4} \sum_{\langle \mathbf{x}, \mathbf{y} \rangle} (\hat{\phi}_{\mathbf{x}} - \hat{\phi}_{\mathbf{y}})^2 + \frac{m^2}{4} \sum_{\mathbf{x}} \hat{\phi}_{\mathbf{x}}^2 \quad (8.59)$$

auf. Aus der Gestalt (8.58) kann man erkennen, dass \hat{T} nicht die Exponentialfunktion eines einfachen Operators \hat{H} ist. Nur im Kontinuumslimites (siehe später) geht \hat{H} über in den bekannten Hamilton-Operator des freien Skalarfeldes.

$$\hat{H} = \frac{1}{2} \int d\mathbf{x} \left(\hat{\pi}_{\mathbf{x}}^2 + m^2 \hat{\phi}_{\mathbf{x}}^2 \right). \quad (8.60)$$

8.3.2 Satz von Frobenius

Bei der Lösung des eindimensionalen Ising-Modells spielt der größte Eigenwert λ_+ der Transfermatrix offensichtlich eine herausragende Rolle. Der folgende Satz macht Aussagen über die Eindeutigkeit dieses Eigenwertes und die Form des zugehörigen Eigenvektors.

Satz [Perron-Frobenius] *Es sein \hat{T} eine hermitesche Matrix mit positiven Matrixelementen T_{ij} . Dann hat \hat{T} einen eindeutigen Eigenvektor zum größten Eigenwert $\|\hat{T}\|$. Die Komponenten des Eigenvektors sind alle ungleich Null und können positiv gewählt werden.*

Beweis: Es sei $\|\psi\|^2 = \sum \psi_i^* \psi_i$ die quadrierte Norm des Vektors $\psi \in \mathbb{C}^n$. Die Norm

einer $n \times n$ -Matrix \hat{T} ist

$$\|\hat{T}\| = \max_{\psi \neq 0} \frac{\|\hat{T}\psi\|}{\|\psi\|}. \quad (8.61)$$

Es sei nun $\tilde{\Omega} = (\tilde{\Omega}_1, \dots, \tilde{\Omega}_n)^T$ ein Vektor zum maximalen Eigenwert $\|\hat{T}\|$,

$$(\tilde{\Omega}, \hat{T}\tilde{\Omega}) = \|\hat{T}\|(\tilde{\Omega}, \tilde{\Omega}),$$

und $\Omega = (|\tilde{\Omega}_1|, \dots, |\tilde{\Omega}_n|)^T$. Die Vektoren $\tilde{\Omega}$ und Ω haben dieselbe Norm. Da nach Voraussetzung die Matrixelemente von \hat{T} nicht-negativ sind gilt offensichtlich

$$(\Omega, \hat{T}\Omega) \geq (\tilde{\Omega}, \hat{T}\tilde{\Omega}) = \|\hat{T}\|(\tilde{\Omega}, \tilde{\Omega}) = \|\hat{T}\|(\Omega, \Omega). \quad (8.62)$$

Mit der *Schwartzschen Ungleichung* folgt weiter

$$(\Omega, \hat{T}\Omega) \leq \|\Omega\| \|\hat{T}\Omega\| \leq \|\hat{T}\| \|\Omega\|^2. \quad (8.63)$$

Diese beiden Ungleichungen implizieren

$$(\Omega, \hat{T}\Omega) = \|\hat{T}\|(\Omega, \Omega).$$

Damit ist Ω ebenfalls ein Eigenvektor zum maximalen Eigenwert von \hat{T} . Keine der Komponenten dieses reellen Eigenvektors kann Null sein:

$$0 < \sum_j T_{ij}\Omega_j = (\hat{T}\Omega)_i = \|\hat{T}\|\Omega_i \implies \Omega_i > 0.$$

Es folgt nun, dass $\tilde{\Omega}$ und Ω *linear abhängig* sein müssen. Um dies einzusehen setzen wir

$$\tilde{\Omega}_j = e^{i\varphi_j}\Omega_j$$

in $(\tilde{\Omega}, \hat{T}\tilde{\Omega}) = (\Omega, \hat{T}\Omega)$ ein, und dies führt auf

$$\sum \tilde{\Omega}_j^* T_{jk} \tilde{\Omega}_k = \sum \Omega_j T_{jk} \Omega_k e^{i(\varphi_k - \varphi_j)} = \sum \Omega_j T_{jk} \Omega_k,$$

was $\varphi_k = \varphi_j \equiv \varphi$ nach sich zieht. Also sind Ω und $\tilde{\Omega}$ linear abhängig, $\tilde{\Omega} = e^{i\varphi}\Omega$. Nun folgt sofort der Satz von PERRON und FROBENIUS: es seien $\Omega^{(1)}$ und $\Omega^{(2)}$ zwei linear unabhängige Eigenvektoren zum größten Eigenwert. Gemäß unseren Betrachtungen dürfen wir annehmen, dass alle Komponenten dieser Vektoren positive Zahlen sind.

Dann gibt es immer ein $\alpha > 0$, so dass der Eigenvektor zum gleichen maximalen Eigenwert

$$\Omega^{(1)} - \alpha\Omega^{(2)}$$

positive und nicht-positive Komponenten hat. Dies widerspricht aber den gerade bewiesenen Eigenschaften eines derartigen Eigenvektors.

8.4 Nullstellen der Zustandssumme

Die Nullstellen von $Z_\Lambda(\beta, h)$ als Funktion der komplexen *Fugazität*

$$z = e^{2\beta h} \tag{8.64}$$

geben nach YANG und LEE Aufschluss über eventuelle Phasenübergänge [40]. Oberhalb der kritischen Temperatur T_c ist die Zustandssumme ungleich Null in der Umgebung der reellen Achse in der komplexen z -Ebene. Für $T \rightarrow T_{c+}$ nähern sich Nullstellen der reellen Achse und zeigen einen Phasenübergang an. Für das Ising-Modell mit $K = \beta J$ und Fugazität $z = \exp(2\beta h)$ ist die Zustandssumme

$$\begin{aligned} Z_\Lambda(K, z) &= z^{-V/2} \sum_w \exp\left(K \sum_{\langle xy \rangle} s_x s_y\right) \underbrace{z^{(V + \sum s_x)/2}}_{z^k} \\ &= z^{-V/2} \sum_{k=0}^V a_k(K) z^k = z^{-V/2} P_\Lambda(z), \end{aligned} \tag{8.65}$$

bis auf den Faktor $z^{-V/2}$ ein Polynom vom Grad $V = |\Lambda|$ in der Fugazität. Für das endliche System ist die freie Energie eine analytische Funktion in $z > 0$ und entsprechend gibt es keinen Phasenübergang. Aber für $V \rightarrow \infty$ können Phasenübergänge auftreten und nach LEE und YANG müssen wir das Verhalten der Nullstellen für große Volumen untersuchen. Falls es ein Gebiet G in der komplexen Fugazitätsebene gibt, welches frei von Nullstellen ist und die reelle Achse einschließt, so sind dort die thermodynamischen Größen im Limes $V \rightarrow \infty$ analytisch. Phasenübergänge werden durch Schnitte der Nullstellenmenge mit \mathbb{R}^+ bestimmt. Schnittpunkte geben die Werte der Systemparameter (Temperatur, Magnetfeld,...) von Phasenübergängen an.

Das obige Polynom $P_\Lambda(z)$ hat V komplexe Nullstellen z_k . Da die Koeffizienten a_k in (8.65) reell sind, ist mit z_k auch \bar{z}_k eine Nullstelle. Da die Koeffizienten auch positiv sind, liegen die z_k nicht auf der positiven reellen Achse. Die Menge der Spin-konfigurationen enthält mit $w = \{s_x | x \in \Lambda\}$ auch die gespiegelte Konfiguration

$-w = \{-s_x | x \in \Lambda\}$. Wegen $H(w, h) = H(-w, -h)$ ändert die Zustandssumme sich nicht, wenn wir h durch $-h$ oder z durch $1/z$ ersetzen,

$$Z_\Lambda(K, z) = \sum_w e^{-\beta H(w, h)} \stackrel{w' = -w}{=} \sum_{w'} e^{-\beta H(w', -h)} = Z_\Lambda(K, 1/z). \quad (8.66)$$

Wir folgern aus dieser \mathbb{Z}_2 -Invarianz, dass mit z_k auch $1/z_k$ eine Nullstelle von P_Λ sein muss. Dies schränkt das Polynom P_Λ weiter ein,

$$P_\Lambda(z) = z^V P_\Lambda(1/z) \quad \text{oder} \quad a_k = a_{V-k} > 0, \quad (8.67)$$

Für die Ising-Kette können wir die Nullstellen der Zustandssumme (8.8) explizit angeben: Z_Λ verschwindet für

$$\lambda_+^N + \lambda_-^N = 0 \quad \text{oder} \quad \lambda_+ = e^{in\pi/N} \lambda_-, \quad n = 1, 3, \dots, 2N - 1.$$

Mit (8.6) folgt daraus

$$i \sin\left(\frac{n\pi}{2N}\right) \cosh(\beta h_n) = \sqrt{e^{-4K} + \sinh^2(\beta h_n)} \cos\left(\frac{n\pi}{2N}\right)$$

und mit $\beta h_n = i\theta_n$ die Gleichung

$$\sin\frac{n\pi}{2N} \cos\theta_n = \sqrt{\sin^2\theta_n - e^{-4K}} \cos\left(\frac{n\pi}{2N}\right).$$

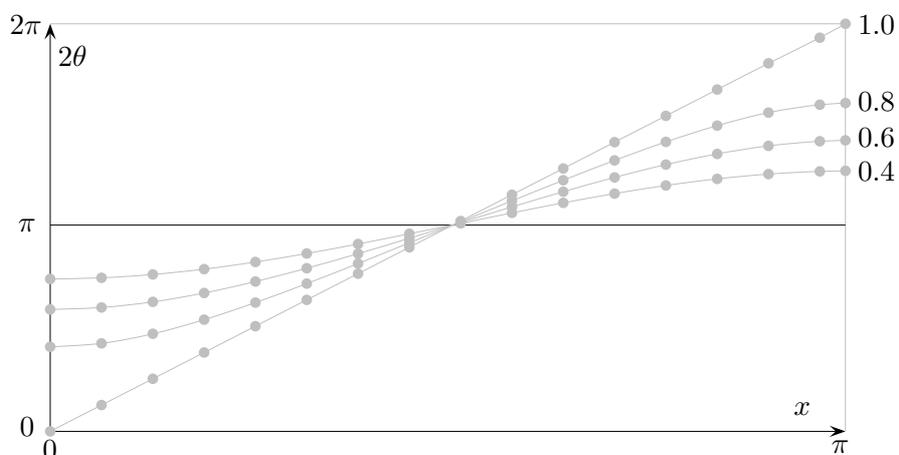
Quadrieren wir diese Gleichung und benutzen $\cos^2 = 1 - \sin^2$, so finden wir folgende Formeln für die halben Phasen θ_n der Yang-Lee Nullstellen $z_n = \exp(2i\theta_n)$,

$$\cos\theta_n(K) = \sqrt{1 - e^{-4K}} \cos\left(\frac{n\pi}{2N}\right), \quad n = 1, 3, \dots, 2N - 1. \quad (8.68)$$

Da der Wurfaktor im Intervall $[0, 1]$ liegt gibt es zu jedem n eine reelle Lösung θ_n und alle Nullstellen liegen auf dem Einheitskreis in der komplexen Fugazitätsebene. Für $T = 0$ ist die Wurzel 1 und die Nullstellen sind äquidistant. In der folgenden Abbildung haben wir Argumente der Nullstellen,

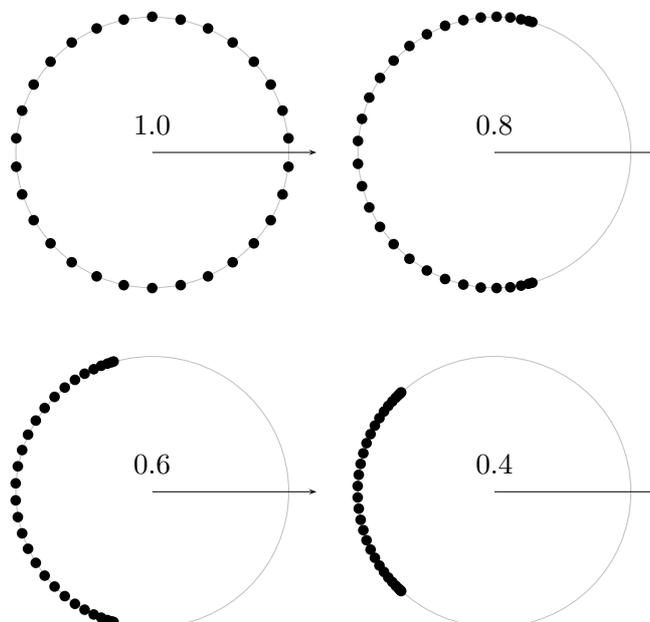
$$2\theta = 2 \arccos(\alpha \cos x) \quad \text{mit} \quad \alpha = \sqrt{1 - e^{-4K}},$$

für die Werte $\alpha = 1.0, 0.8, 0.6$ und 0.4 geplottet.



Für positive Temperaturen ist α kleiner 1 und entsprechend ist $\theta \in [\Delta, \pi - \Delta]$ mit $\Delta = \arccos \alpha > 0$. Der Abstand zwischen \mathbb{R}^+ und den Nullstellen ist mindestens $\sin \Delta > 0$ und es gibt keinen Phasenübergang für $T > 0$. Nur für $T = 0$ erwarten wir eine Singularität der freien Energiedichte bei $z = 1$, also bei verschwindendem Magnetfeld.

Die Lee-Yang-Nullstellen liegen alle auf dem Einheitskreis in der komplexen Fugazitätsebene. In der folgenden Abbildung sind die Nullstellen von $Z_\Lambda(z)$ für $|\Lambda| = 30$ und verschiedene Werte von α eingezeichnet.

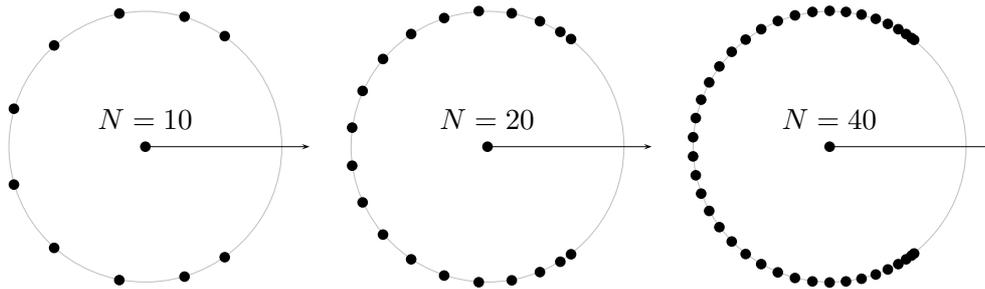


In der nächsten Abbildung sind die Nullstellen für

$$\alpha = \sqrt{1 - e^{-4K}} = 0.9,$$

also für eine positive Temperatur und für verschiedene Gittergrößen geplottet. Im thermodynamischen Grenzfall $N \rightarrow \infty$ häufen sich die Nullstellen von $Z_\Lambda(z)$ an der Lee-Yang-Kante bei

$$\Re z = \cos(2 \arccos 0.9) \quad \text{und} \quad \Im z = \sin(2 \arccos 0.9).$$



8.5 Dualitätsrelationen für Potts-kette

In diesem Abschnitt werden wir zeigen, dass die Zustandssummen der Potts-kette (8.34) eine Dualitätstransformation zulässt. Diese Eigenschaft bestimmt die Lage ihrer Nullstellen im Raum der Kopplungen K . Dazu betrachten wir die Hilfsfunktion

$$\begin{aligned} \tilde{Z}_\Lambda(\zeta, z) &= ((\zeta - 1)(z - 1))^{-N/2} Z_\Lambda(\zeta, z) \\ &= q' \left(\frac{\zeta - 1}{z - 1} \right)^{N/2} + \left(\frac{\lambda_+}{\sqrt{(\zeta - 1)(z - 1)}} \right)^N + \left(\frac{\lambda_-}{\sqrt{(\zeta - 1)(z - 1)}} \right)^N, \end{aligned}$$

die unter der Dualitätstransformation der Variablen $z = e^{2\beta h}$ und $\zeta = e^{\beta J}$ gemäß

$$(\zeta^* - 1)(z - 1) = q, \quad (z^* - 1)(\zeta - 1) = q \quad (8.69)$$

in sich übergeht,

$$\tilde{Z}_\Lambda(\zeta, z) = \tilde{Z}_\Lambda(\zeta^*, z^*). \quad (8.70)$$

Die Beziehungen (8.69) definieren zwei gebrochen lineare Möbius-Transformationen,

$$\zeta^* = \frac{z + q - 1}{z - 1} \quad \text{und} \quad z^* = \frac{\zeta + q - 1}{\zeta - 1}, \quad (8.71)$$

die verallgemeinerte Kreislinien in verallgemeinerte Kreislinien abbilden. Die Terme

$$\frac{\zeta - 1}{z - 1}, \quad \frac{\lambda_+}{\sqrt{(\zeta - 1)(z - 1)}} \quad \text{und} \quad \frac{\lambda_-}{\sqrt{(\zeta - 1)(z - 1)}},$$

aus deren Potenzen \tilde{Z}_Λ berechnet wird, sind einzeln invariant unter der Transformation (8.69). Für den ersten Term ist dies evident, für die beiden anderen Terme weniger.

Für die *Isingette* hat die Zustandssumme auf der rechten Seite in

$$Z_\Lambda(\zeta, z) = \left(\frac{(\zeta - 1)(z - 1)}{(\zeta^* - 1)(z^* - 1)} \right)^{N/2} Z_\Lambda(\zeta^*, z^*) \quad (8.72)$$

Nullstellen bei

$$\zeta^* = e^{2K^*} > 0 \quad \text{und} \quad z^* = e^{2i\theta_n(K^*)}, \quad (8.73)$$

wobei $\theta_n(K^*) \in \mathbb{R}$ in (8.68) gegeben ist. Mit der inversen Dualitätstransformation

$$\zeta \equiv e^{2K} = \frac{z^* + 1}{z^* - 1} = -i \cot \theta_n(K^*) \quad (8.74)$$

folgt, dass für festes $\beta h \in \mathbb{R}$ die Nullstellen von Zustandssumme $Z_\Lambda(\zeta, z)$ des Ising-Modells in der komplexen $\zeta = e^{2K}$ -Ebene auf der imaginären Achse liegen [41].

8.6 Programm: Simulation des 1d Ising Modells

Das folgende Programm `glgew1d.c` simuliert das eindimensionale Ising-Modell mit Energiefunktion

$$H(w) = -J \sum_{x=1}^N s_x s_{x+1} - h \sum_{x=1}^N s_x, \quad s_x = \pm 1. \quad (8.75)$$

Die ersten 500 Iterationen dienen zur Thermalisierung des Systems. Danach wird nur jede 20'ste Konfiguration ausgewertet um Korrelationen zwischen den Konfigurationen zu unterdrücken. Das Programm ist selbsterklärend. Es braucht die Datei `constantsising.h` auf Seite 153, in der die globalen Variablen und Konstanten N, M, MG, MA und die Kopplungskonstante J definiert sind sowie die header-datei `stdmcising.h` mit wichtigen Funktionen.

Für die Temperatur $T = 2.0$ werden die berechneten Werte für die Magnetisie-

ung im File `isingT=2.0` gespeichert. Dieser File befindet sich im Unterverzeichnis `.is1data` des Verzeichnisses, aus dem das Programm `glgew1d.c` aufgerufen wird.

`glgew1d.c` Braucht `constantsising.h` und `stdmcising.h`.

```

/* Programm ising1d.c */
/* Simulation des ferromagnetischen 1d Isingmodells */
/* Es wird die Magnetisierung fuer verschiedene Werte */
/* des Mangentfeldes berechnet und im File */
/* ./is1data/isingT=.. gespeichert. */
#include <stdio.h>
#include <stdlib.h>
#include <math.h>
#include <string.h>
#include <time.h>
#include "constantsising.h"
#include "stdmcising.h"
int main(void)
{
    srand48(time(NULL));
    /* Temperatur einlesen */
    puts("Temperatur_(3_Zeichen)_=_");
    scanf("%3s",temp);
    beta=1/ atof(temp);
    strncat(ising1,temp,3);
    a=4*beta*J;
    fp=fopen(ising1,"w");
    fprintf(fp,"#_N=_%i_,_T=_%.3f\n",N,1/beta);
    fprintf(fp,"#_Magnetisierung_1-d_Ising\n");
    /* Anfangskonfiguration */
    for (i=0;i<N;i++)
        s[i]=-1; /* kalte Anfangskonfiguration */
    /* if (rand()<1073741823) s[i]=1 else s[i]=-1 */
    /* Ins Gleichgewicht bringen */
    h=-5.0;b=2*beta*h;
    /* Boltzmanngewichte berechnen */
    boltzmann();
    for (i=0;i<MG;i++) mcsweep(s);
    /* Simulation und Berechnung */
    /* Simulation fuer h von -5 bis 5 */
    /* in Schritten von 0.5 */
    for (i=-10;i<11;i++){
        h=0.5*i;b=2*beta*h;
        boltzmann(); pruef();
        ann=0; mittell=0;
        for (j=0;j<M;j++){
            mcsweep(s);
            mittell=mittell+moments(1,s);
        };
        printf("angenommen_%.2f\n", (float)ann/(N*MA*M));
        fprintf(fp,"%4.1f_%.6f\n",h,2*mittell/M);
    };
    fclose(fp);
    return 0;
}

```

constantsising.h Diese Datei enthält Konstanten und globale Variablen.

```

/* Headerdatei constantsising.h */
/* Konstanten: N,M,MG,MA,J */
/* Variablen s[N], ising1[], etc. */
#define N 128 /* Anzahl Gitterpunkte */
#define M 10000 /* Anzahl Iterationen */
#define MG 500 /* bis zum Gleichgewicht */
#define MA 20 /* jede MA-te Konfiguration gemessen */
#define J 1.0
short nm, si, s[N], test[3][5];
unsigned int j, k;
double mittell;
float a, b, vorz, beta, boltz[3][5], h;
int i, ann=0;
FILE *fp;
char temp[20], ising1[] = "./is1data/isingT=";

```

stdmcising.h Die Datei enthält wichtige vom Hauptprogramm `glgew1d.c` aufgerufenen Funktionen. Es werden die in `constantsising.h` deklarierten Konstanten, Variablen und die Größen

$$a = 4\beta J \quad \text{und} \quad b = 2\beta h.$$

benötigt. Die Arrays `test` und `boltz` werden für die Monte-Carlo Iterationen gebraucht. Das erste Argument dieser Arrays ist der Wert des behandelten Spins s_x , plus 1, und das zweite Argument die Summe der Spins der nächsten Nachbarn, plus 2. Nimmt die Energie bei der Änderung von s_x ab, so ist `test = 0`, andernfalls 1. Im Array `boltz` werden die Boltzmanngewichte abgelegt. Damit spart man etwas Rechenzeit, da die Berechnung der Exponentialfunktion Zeit kostet. Die Kernroutine ist `mcsweep`. Hier finden sich $MA \cdot MC$ -Iterationen durch das Gitter. Es wird jeweils noch geprüft, wie oft ein Änderungsvorschlag angenommen wird.

```

/* Headerdatei stdmcising.h */
/* Funktionen pruef und boltz: */
/* Bereitstellung der Arrays test und boltzmann.*/
/* mcsweep: MA sweeps durch das Gitter */
/* moments: Berechnung des mittleren Spins */
void pruef(void)
{
    if (b>0){
        test[2][4]=1; test[2][2]=1; test[0][2]=0; test[0][4]=0;
        if (b>a) {test[0][0]=0; test[2][0]=1;}
        else {test[0][0]=1; test[2][0]=0;};
    }
    else{
        test[2][0]=0; test[0][2]=1; test[2][2]=0; test[0][0]=1;
        if (a+b>0) {test[2][4]=1; test[0][4]=0;}
        else {test[2][4]=0; test[0][4]=1;};
    }
}
void boltzmann(void)

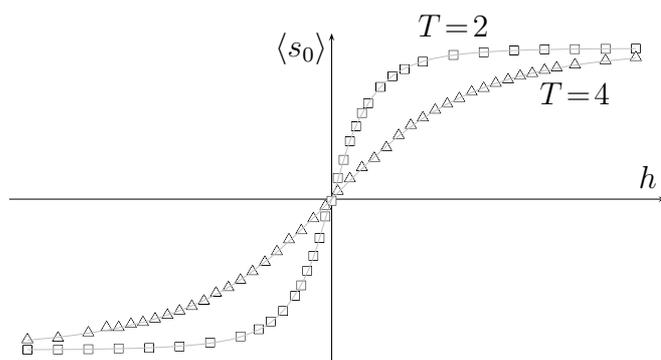
```

```

{
  boltz [2][4]= exp(-a-b); boltz [2][2]= exp(-b);
  boltz [2][0]= exp (a-b); boltz [0][4]= exp (a+b);
  boltz [0][2]= exp (b); boltz [0][0]= exp(-a+b);
}
void mcsweep(short *s)
{
  int p,q;
  for (p=0;p<MA;p++)
    for (q=0;q<N;q++){
      nn=s [(q+1)%N]+s [(q+N-1)%N]+2;
      si=s [q]+1;
      if (test [si ,nn]==0) {s [q]=-s [q];ann=ann+1;}
      else
        if (drand48()<boltz [si][nn]){
          s [q]=-s [q];ann=ann+1;};
    };
}
/* Berechnung der Momente */
double moments(short n,short *s)
{
  int p,sum=0;
  for (p=0;p<N;p++)
    sum=sum+s [p];
  /*sum=sum+pow(s [il] ,n); */
  return (double)sum/N;
}

```

Mit diesem Code haben wir die Magnetisierung in Abhängigkeit von h für verschiedene Temperaturen bestimmt. In der folgenden Abbildung sind die Resultate unserer Monte-Carlo Simulationen für $N = 128$ eingezeichnet.



Die kleinen Quadrate sind die Werte für $T = 2$ und die Dreiecke gehören zu $T = 4$. Die Kurven gehören zur exakten Lösung im thermodynamischen Grenzfall $N \rightarrow \infty$. Die Übereinstimmung zwischen den MC-Daten für $N = 128$ und der exakten Lösung für $N = \infty$ ist bemerkenswert.

Kapitel 9

Heiße und kalte Spinmodelle

Wir besprechen hier die Hochtemperaturentwicklung in Potenzen von $v = \tanh \beta J$ und die Tieftemperaturentwicklung in Potenzen von $e^{-2\beta J}$ für das Isingmodell. In beiden Entwicklungen werden die Terme einer festen Ordnung durch eine bestimmte Klasse von Graphen auf dem Gitter charakterisiert. Zur Einstimmung betrachten wir die einfache Isingkette.

9.1 Isingkette

Im Zustand mit der geringsten Energie sind alle N Spins der Isingkette vollständig ausgerichtet und in diesem Zustand befindet sich das System bei $T = 0$. Was geschieht nun, wenn wir das System leicht erwärmen. Die Energie kann durch Umklappen einiger Spins nur zunehmen. Bei einer festen *tiefen Temperatur* können wir angeregte Zustände mit $1, 2, \dots, N$ umgeklappten Spins betrachten. Zum Beispiel, für ein System mit 5 Spins

$$\begin{array}{cccccc}
 \uparrow & \uparrow & \uparrow & \uparrow & \uparrow & -5J - 5h & \downarrow & \downarrow & \downarrow & \downarrow & \downarrow & -5J + 5h \\
 \uparrow & \uparrow & \uparrow & \uparrow & \downarrow & -J - 3h & \downarrow & \downarrow & \downarrow & \downarrow & \uparrow & -J + 3h \\
 \uparrow & \uparrow & \uparrow & \downarrow & \downarrow & -J - h & \downarrow & \downarrow & \downarrow & \uparrow & \uparrow & -J + h \\
 \uparrow & \downarrow & \uparrow & \downarrow & \uparrow & 3J - h & \downarrow & \uparrow & \downarrow & \uparrow & \downarrow & 3J + h
 \end{array}$$

Die Zustandssumme hat folgende *Tieftemperaturentwicklung* für $e^{-K} \ll 1$:

$$Z = e^{-\beta E_0} \left(1 + e^{-10h} + 5e^{-\beta(4J+2h)} + 5e^{-\beta(4J+8h)} \right)$$

$$+5e^{-\beta(4J+4h)} + 5e^{-\beta(4J+6h)} + 5e^{-\beta(8J+4h)} + 5e^{-\beta(8J+6h)})$$

Die systematische Tieftemperaturentwicklung wird im $2d$ -Modell besprochen.

Bei *hohen Temperaturen* $K = \beta J \ll 1$ ist der Effekt der Spinwechselwirkung gering und eine Störungsentwicklung im kleinen Parameter K macht Sinn. Wir betrachten die Kette ohne äußeres Magnetfeld und schreiben

$$Z_\Lambda = \sum_w \prod_{\langle x,y \rangle} e^{K s_x s_y}, \quad K = \beta J. \quad (9.1)$$

Wir benutzen die Identität

$$e^{K s_x s_y} = \cosh K + s_x s_y \sinh K = \cosh K (1 + v s_x s_y), \quad v = \tanh K.$$

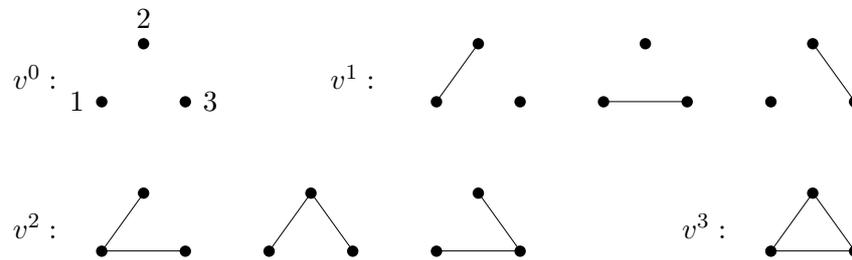
Zum Beweis der Identität betrachte man die beiden Fälle $s_x s_y \in \{-1, 1\}$. Der Parameter v strebt für hohe Temperaturen gegen Null und dient als Entwicklungsparameter. Es folgt

$$Z_\Lambda = (\cosh K)^P \sum_w \prod_{\langle x,y \rangle} (1 + v s_x s_y), \quad (9.2)$$

wobei P die Anzahl nächster Nachbarn-Paare im Gitter ist, also die Anzahl Wechselwirkungsterme. Für ein hyperkubisches Gitter in d Dimensionen ist $P = Vd$. Wir betrachten wieder ein einfaches Beispiel eines eindimensionalen periodischen Gitters mit 3 Gitterpunkten. Dann ist $P = 3$ und das Produkt (9.2) hat 3 Faktoren, $(1 + v s_1 s_2)(1 + v s_2 s_3)(1 + v s_3 s_1)$. Entwickeln wir es in Potenzen von v , dann erhalten wir $2^P = 8$ Terme,

$$Z_\Lambda = (\cosh K)^3 \sum_{s_1=-1}^1 \sum_{s_2=-1}^1 \sum_{s_3=-1}^1 \left(1 + v(s_1 s_2 + s_2 s_3 + s_3 s_1) + v^2(s_1 s_2 s_2 s_3 + s_1 s_2 s_3 s_1 + s_2 s_3 s_3 s_1) + v^3(s_1 s_2 s_2 s_3 s_3 s_1) \right). \quad (9.3)$$

Hier ist es angebracht, eine bijektive Beziehung zwischen den acht Termen und Diagrammen auf dem Gitter herzustellen. Die Menge der zugehörigen acht Diagramme ist in der folgenden Figur gezeigt. Da der Entwicklungsparameter v im Produkt (9.3) in der Form $v s_x s_y$ erscheint, hat ein Diagramm der Ordnung n genau n Linien.



Wegen der Identität

$$\sum_{s_x=-1}^1 s_x^n = \begin{cases} 2 & n \text{ gerade} \\ 0 & n \text{ ungerade} \end{cases} \tag{9.4}$$

finden wir folgende Zustandssumme für 3 Spins

$$Z = \cosh^3 K (8 + 8v^3) = 2^3 (\cosh^3 K + \sinh^3 K).$$

Nun verallgemeinern auf die Kette mit N Spins. Wir haben gesehen, dass nur Diagramme beitragen, an deren Vertices eine gerade Anzahl von Linien enden. Derartige Diagramme nennt man geschlossen. Für die Isingkette können an einem Vertex höchstens zwei Linien enden (jeder Vertex hat zwei nächste Nachbarn). Obwohl es für N Gitterpunkte 2^N Diagramme gibt, tragen nur diejenigen der Ordnung v^0 (keine Linie) und der Ordnung v^N zu Z_Λ bei. Also ist

$$Z_\Lambda = (\cosh K)^N (2^N + 2^N v^N) = 2^N (\cosh^N K + \sinh^N K). \tag{9.5}$$

Die Hochtemperaturentwicklung führt bei der Isingkette auf das exakte Resultat für die Zustandssumme.

9.2 2d Ising-Modell

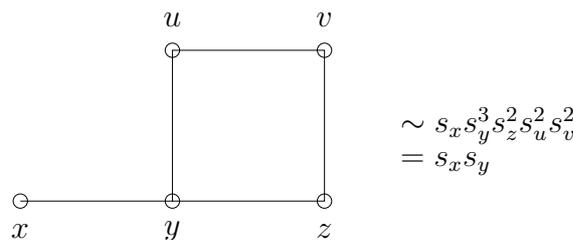
Neben Monte-Carlo Simulationen und der Molekularfeldapproximation sind die Hoch- und Tieftemperaturentwicklungen in Gittertheorien von großer Bedeutung. Bei der Tieftemperaturentwicklung studiert man die Abweichungen vom Zustand minimaler Energie (oder Wirkung in der Feldtheorie). Sie entspricht der Entwicklung für kleine Kopplungskonstanten in der Feldtheorie. Für kontinuierlich variierende Felder findet man die übliche Störungstheorie (im Kontinuum oder auf dem Gitter). Bei der Hochtemperaturentwicklung entwickelt man um einen zufälligen Zustand. Sie entspricht der starken Kopplungsentwicklung in der Feldtheorie.

9.2.1 Hochtemperaturentwicklung

Analog zum eindimensionalen Fall schreiben wir für sehr hohe Temperaturen oder $K = \beta J \ll 1$ beziehungsweise $v = \tanh K \ll 1$ die Zustandssumme des 2-dimensionalen Ising-Modells auf dem quadratischen Gitter für verschwindendes Magnetfeld wie folgt um

$$\begin{aligned}
 Z &= \sum_w \prod_{\langle xy \rangle} e^{K s_x s_y} = (\cosh K)^P \sum_w \prod_{\langle xy \rangle} (1 + v s_x s_y) \\
 &= (\cosh K)^P \sum_w \left(1 + v \sum_{\langle xy \rangle} s_x s_y + v^2 \sum_{\langle xy \rangle \neq \langle x'y' \rangle} s_x s_y s_{x'} s_{y'} + \dots \right). \quad (9.6)
 \end{aligned}$$

Hier bezeichnet P die Anzahl Paare von nächsten Nachbarn. Jedem Spinprodukt wird ein Graph zugeordnet



Die Vertices x, y sind ungerade und die Vertices u, v, z gerade. Ein Graph gibt den Beitrag 2^V zur Zustandssumme falls alle Vertices gerade sind und 0 sonst. Somit ist

$$Z = (\cosh K)^P 2^V \sum_{\ell=0}^P g_\ell v^\ell, \quad (9.7)$$

wobei g_ℓ die Zahl der Graphen aus ℓ Linien mit lauter geraden Vertices ist. g_0 ist 1. Als Beispiel betrachten wir das 2-dimensionale Ising-Modell mit quadratischem Gitter, für das $P = 2V$ ist. Die folgende Tabelle enthält alle Graphen mit und bis zur Ordnung v^8 . Die dritte Spalte enthält die Anzahl Graphen der entsprechenden Sorte.

ℓ	Graphen	Anzahl	g_ℓ
4		V	V
6		$2V$	$2V$
8		$4V$	$\frac{1}{2}V^2 + \frac{7}{2}V$
		$2V$	
		$\frac{1}{2}V(V-5)$	

Zum Beispiel, die Zahl $V(V - 5)/2$ in der letzten Zeile erhält man wie folgt: Die erste der beiden Plaketten kann man irgendwo auf das Gitter legen, also an V verschiedene Orte. Der Mittelpunkt der zweiten Plakette darf dann weder mit demjenigen der ersten Plakette zusammenfallen noch im Mittelpunkt der 4 benachbarten Plaketten liegen. Wir können sie also an $V - 5$ verschiedene Stellen legen und erhalten $V(V - 5)$ Möglichkeiten die beiden Plakette so zu legen, dass keine ihrer Seiten zusammenfallen. Beim Vertauschen der beiden Plaketten erhalten wir aber denselben Graphen, so dass wir schlussendlich $V(V - 5)/2$ verschiedene Graphen finden.

Damit hat die Zustandssumme des 2-dimensionalen Ising-Modells die Hochtemperaturoentwicklung

$$Z = (\cosh K)^P 2^V \left(1 + Vv^4 + 2Vv^6 + \frac{1}{2}(V^2 + 7V)v^8 + \dots \right). \tag{9.8}$$

Den thermodynamischen Grenzfall erhält man durch formales Rechnen mit Potenzreihen. Dazu machen wir wegen

$$Z = \exp(-V\beta f) \tag{9.9}$$

folgenden Ansatz für die frei Energiedichte,

$$e^{-\beta f} = (\cosh K)^{P/V} \cdot 2 \cdot \sum_{\ell=0}^{\infty} c_\ell v^\ell. \tag{9.10}$$

Aus (9.9) folgt dann mit (9.7)

$$1 + \sum_{\ell \geq 1} g_\ell v^\ell = \left(1 + \sum_{\ell \geq 1} c_\ell v^\ell \right)^V$$

$$= 1 + \binom{V}{1} (c_1 v + c_2 v^2 + \dots) \\ + \binom{V}{2} (c_1 v + c_2 v^2 + \dots)^2 + \dots$$

und durch Koeffizientenvergleich erhält man c_0, \dots, c_n aus g_0, \dots, g_n . Dabei fällt V exakt heraus, falls die g_ℓ für ein genügend großes Gitter auf dem Torus berechnet werden.

Für das 2-dimensionale Ising-Modell auf dem quadratischen Gitter ist $Z \sim (1 + Vv^4 + \dots)$ und deshalb ist $c_1 = c_2 = c_3 = 0$. Man findet

$$Vv^4 + 2Vv^6 + \frac{1}{2}(V^2 + 7V)v^8 + \dots \\ = Vc_4v^4 + Vc_6v^6 + \left(Vc_8 + \frac{1}{2}(V^2 - V)c_4^2\right)v^8 + \dots$$

oder $c_4 = 1$, $c_6 = 2$ und $c_8 = 4$. Deshalb ist

$$e^{-\beta f} = 2(\cosh K)^2 (1 + v^4 + 2v^6 + 4v^8 + O(v^{10})). \quad (9.11)$$

Daraus kann man die Potenzreihe für die freie Energiedichte ausrechnen.

Korrelationsfunktionen

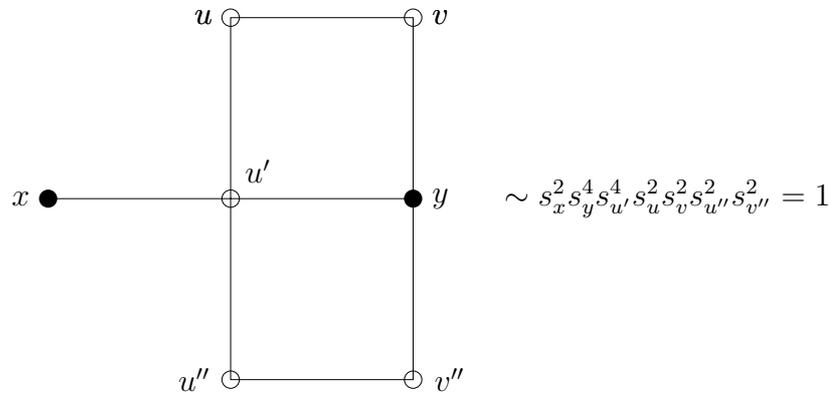
Oberhalb der kritischen Temperatur verschwindet für $h = 0$ die Magnetisierung, $\langle s_x \rangle = 0$, und die Suszeptibilität ist

$$\chi = \frac{1}{V} \sum_{xy} \langle s_x s_y \rangle = \sum_y \langle s_x s_y \rangle. \quad (9.12)$$

Nun wird wieder jedem Term in der Hochtemperaturentwicklung

$$\langle s_x s_y \rangle = \frac{\cosh^P K}{Z} \sum_w s_x s_y \left(1 + v \sum_{\langle uw \rangle} s_u s_w + v^2 \sum_{\langle uw \rangle \neq \langle u'v' \rangle} s_u s_w s_{u'} s_{v'} + \dots \right) \quad (9.13)$$

ein eindeutiger Graph zugeordnet. Zum Beispiel



Dieser Graph trägt mit 2^V zur Summe über alle Konfigurationen in (9.13) bei. Ein Graph trägt genau mit 2^V bei, wenn die Vertices x und y ungerade, und alle anderen Vertices gerade sind. Andere Graphen tragen wegen

$$\sum_{s_x=-1}^1 s_x^n = \begin{cases} 2 & n \text{ gerade} \\ 0 & \text{sonst} \end{cases}$$

nicht bei. Der Faktor $\cosh^P K \cdot 2^V$ kann gegen den gleichen Faktor von Z in (9.8) gekürzt werden. Es folgt das

Lemma Die Zweipunktsfunktion hat folgende Hochtemperaturentwicklung,

$$\langle s_x s_y \rangle = \frac{\sum_{\ell} g'_{\ell} v^{\ell}}{\sum_{\ell} g_{\ell} v^{\ell}}$$

wobei die g'_{ℓ} die Anzahl Graphen mit ℓ Linien ist, deren Vertices x und y ungerade und alle anderen Vertices gerade sind.

Aus diesem Lemma folgt unmittelbar das

Korollar Ist ℓ kleiner als die Länge $d(x, y)$ des kürzesten Weges auf dem Gitter von x nach y , dann verschwindet g'_{ℓ} .

Wäre das Korollar nicht wahr, dann gäbe es einen Graphen mit $< \ell$ Linien, für den x, y ungerade und alle anderen Vertices gerade wären. Die Linien könnte die Punkte x und y also nicht verbinden und der Graph bestünde aus zwei unverbundenen Subgraphen. Da für jeden Graphen die Relation

$$\sum_{\text{Vertices}} \text{Vertexordnung} = 2 \cdot \text{Anzahl Linien}$$

gilt, wobei die Ordnung eines Vertex die Anzahl der einlaufenden Linien ist, muss die Summe der Vertexordnungen für jeden Subgraph gerade sein. Aber die Ordnung des zu x gehörenden Subgraphen ist

$$\text{Ord}(x) + \text{gerade Zahl} = \text{ungerade},$$

im Gegensatz zu der Forderung, dass diese Zahl gerade sein muss. Also gibt es keinen zulässigen Graphen der Ordnung $< \ell$.

Für das 2-dimensionale Ising-Modell auf dem quadratischen Gitter gilt also

$$\langle s_x s_y \rangle = O(v^{d(x,y)}) = O(e^{-d(x,y)/\xi}), \quad \frac{1}{\xi} = \log \frac{1}{v} \gg 1, \quad (9.14)$$

wobei $d(x, y)$ der kleinste Abstand von x und y auf dem Gitter ist. Die Korrelationslänge wird mit zunehmender Temperatur kleiner. Die thermischen Fluktuation unterdrücken Korrelationen über größere Distanzen.

Wollen wir die Suszeptibilität χ bis zur Ordnung v^n berechnen, so müssen wir in der Summe (9.12) nur Zweipunktsfunktionen $\langle s_x s_y \rangle$ mit $d(x, y) \leq n$ berücksichtigen, und diese nur bis zur Ordnung v^n . In jeder Ordnung von v ist χ daher eine endliche Summe. Bei der formalen Division der Potenzreihen fällt V wieder exakt heraus. Zum Beispiel, für Gitterpunkte x, y , deren Koordinaten sich um 1 unterscheiden, so dass $d(x, y) = 2$ ist, finden wir folgende Graphen bis zur Ordnung v^6 :

ℓ	Graphen	Anzahl	g'_ℓ
2		2	2
4		4	4
6		3×4	$2V + 10$
		2×2	
		$2(V - 3)$	

Wir finden die Reihen

$$\langle s_x s_y \rangle = (2v^2 + 4v^4 + (2V + 10)v^6 + \dots) / (1 + Vv^4 + \dots),$$

wobei der Nenner die führenden Terme in der Hochtemperatur-Entwicklung von Z enthält. Es ergibt sich die Reihe

$$\langle s_x s_y \rangle = 2v^2 + 4v^4 + 10v^6 + O(v^8) \quad (9.15)$$

für die betrachtete Zweipunktsfunktion. Diese Reihe tritt in der Suszeptibilität χ viermal auf. Berücksichtigt man die Graphen aller Zweipunktsfunktionen, deren Aufpunkte x, y einen Abstand ≤ 6 haben, so findet man folgende Hochtemperaturentwicklung für die Suszeptibilität,

$$\chi = 1 + 4v + 12v^2 + 36v^3 + 100v^4 + 276v^5 + 740v^6 + \dots \quad (9.16)$$

Mit der Taylorreihe

$$v = \tanh K = K - \frac{K^3}{3} + \frac{2K^5}{15} - \frac{17}{315}K^7 + \dots$$

erhält man die Reihenentwicklung

$$\chi = \sum_{\ell} a_{\ell} K^{\ell}, \quad K = J/T. \quad (9.17)$$

mit den Koeffizienten

ℓ	0	1	2	3	4	5	6
a_{ℓ}	1	4	12	34.666	92	240.543	611.200

Extrapolation zum kritischen Punkt

In der Reihe (9.17) sind alle Koeffizienten a_{ℓ} positiv. Falls die Reihe einen Konvergenzradius $R > 0$ hat, ist χ analytisch auf der Kreisscheibe mit Mittelpunkt 0 und Radius R und hat eine Singularität bei $K = R$. Wir wollen annehmen dies sei der kritische Wert $K_c = J/T_c$. Wir benutzen das *Quotientenkriterium*

$$R = \lim_{\ell \rightarrow \infty} \frac{a_{\ell}}{a_{\ell-1}} = \frac{J}{T_c}. \quad (9.18)$$

Wir versuchen den kritischen Exponenten γ und K_c in der Interpolationsformel

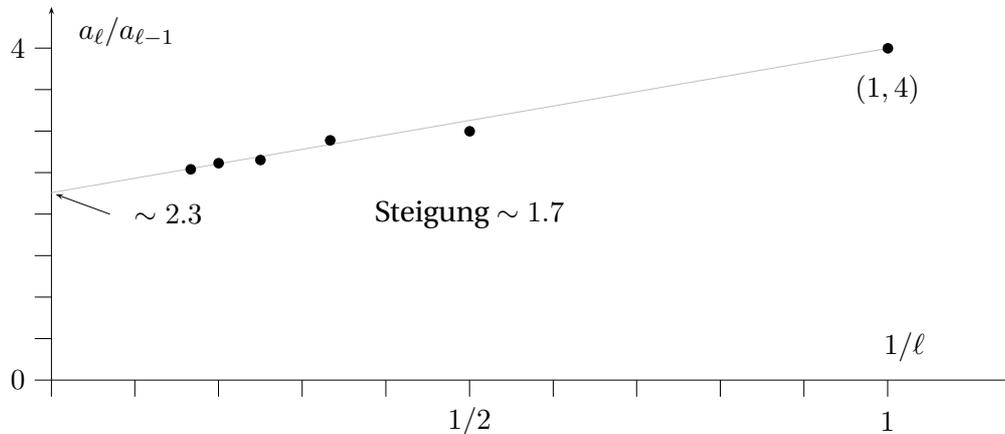
$$\begin{aligned} f(K) &= (1 - K/K_c)^{-\gamma} = 1 + \sum_{\ell=1}^{\infty} \frac{\gamma(\gamma+1)\cdots(\gamma+\ell-1)}{\ell!} \left(\frac{K}{K_c}\right)^\ell \\ &\equiv \sum a'_\ell K^\ell \end{aligned}$$

so zu wählen, dass diese Reihe mit der Hochtemperaturentwicklung (9.17) möglichst gut übereinstimmt. Die Quotienten

$$\frac{a'_\ell}{a'_{\ell-1}} = \frac{1}{K_c} + \frac{\gamma-1}{K_c} \frac{1}{\ell},$$

sind eine lineare Funktion in $1/\ell$. Aus der Steigung der Geraden und dem Wert für $\ell \rightarrow \infty$ kann man die kritische Temperatur und den kritischen Exponenten ablesen.

a_1/a_0	a_2/a_1	a_3/a_2	a_4/a_3	a_5/a_4	a_6/a_5
4	3	2.8888	2.6539	2.6146	2.5409



Eine linearer Fit an die Quotienten $a_\ell/a_{\ell-1}$ ergibt

$$\frac{1}{K_c} \sim 2.3 \quad \text{und} \quad \gamma \sim \frac{1.7}{2.3} + 1 = 1.74.$$

Für die kritische Temperatur finden wir den Wert

$$T_c = 2.3 J \quad \text{bzw.} \quad T_c \sim \frac{2.3}{4} T_{\text{MF}} \sim 0.575 T_{\text{MF}}, \quad T_{\text{MF}} = 4J.$$

Dies liegt bereits relativ nahe am exakten Wert für die kritische Temperatur des 2d Ising-Modells,

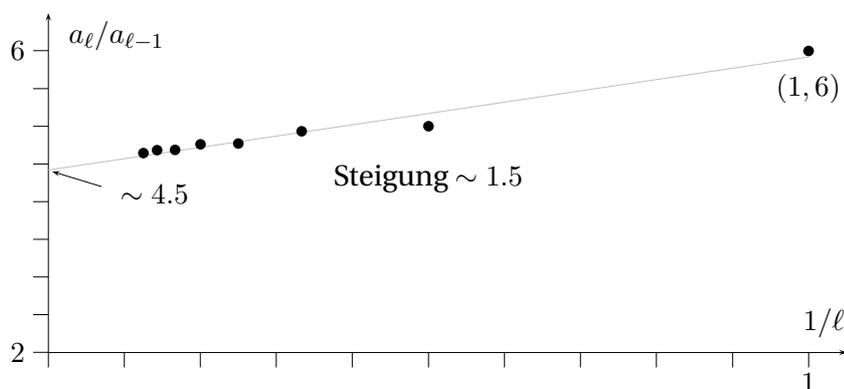
$$\frac{T_c}{T_{\text{MF}}} = \frac{1}{2 \log(1 + \sqrt{2})} \sim 0.5673. \quad (9.19)$$

Für das dreidimensionale Ising-Modell haben GAUNT und SYKES die Hochtemperaturentwicklung bis zur Ordnung 20 berechnet [42]. Die führenden Terme sind

$$\begin{aligned} \chi = & 1 + 6K + 30K^2 + 148K^3 + 706K^4 + \frac{16804K^5}{5} \\ & + \frac{47260K^6}{3} + \frac{7744136K^7}{105} + \frac{35975026K^8}{105} + \dots \end{aligned} \quad (9.20)$$

Die Quotienten der Koeffizienten sind

a_1/a_0	a_2/a_1	a_3/a_2	a_4/a_3	a_5/a_4	a_6/a_5	a_7/a_6	a_8/a_7
6	5	4.9333	4.7703	4.7603	4.6874	4.6818	4.6455



Eine linearer Fit an die Quotienten $a_\ell/a_{\ell-1}$ ergibt

$$\frac{1}{K_c} \sim 4.5 \quad \text{und} \quad \gamma \sim \frac{1.5}{4.5} + 1 = 1.33.$$

Wegen $T_{\text{MF}} = 6J$ ist

$$\frac{T_c}{T_{\text{MF}}} \sim \frac{4.5}{6} = 0.75,$$

und dieser Wert ist weniger als 1 Prozent vom best-bekanntem Wert entfernt. Die Extrapolation für den kritischen Exponenten γ ist allerdings nicht so gut.

9.2.2 Tieftemperaturentwicklung

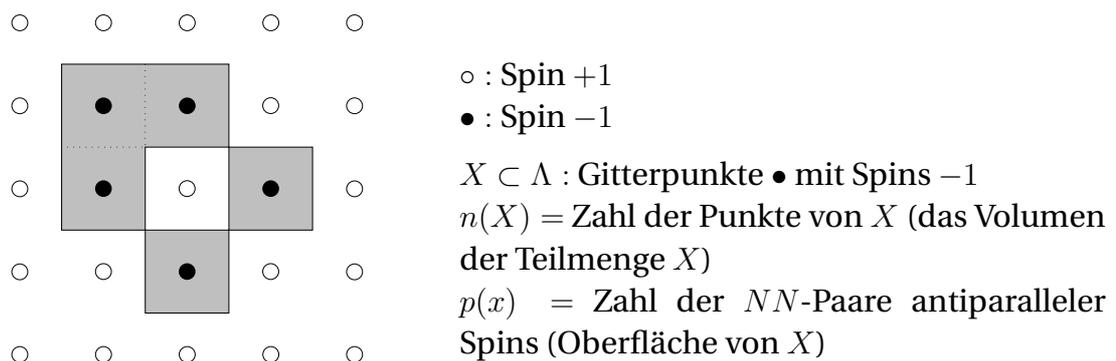
Für ein positives Magnetfeld h hat die geordnete Konfiguration

$$w_0 = \{s_x = 1 | x \in \Lambda\} \tag{9.21}$$

die niedrigste Energie,

$$E_0 = -PJ - Vh. \tag{9.22}$$

Diese Grundzustandsenergie hat die Vielfachheit $g_0 = 1$, ist also nicht entartet. Angeregte Zustände erhält man durch das Umklappen von Spins an gewissen Punkten \bullet des Gitters. Einer Konfiguration w ist eindeutig durch die Menge $X(w)$ der Gitterpunkte mit umgeklappten Spins charakterisiert. Im folgenden Beispiel enthält X 5 Punkte, $n(X) = 5$ und $p(X) = 12$ nächste Nachbarn mit verschiedenen Spins.



Man kann X wie in der Figur durch ein Polygon (Polyeder) darstellen. Auf dem Torus ist allerdings nicht klar, was das Innere oder äußere des Graphen von X ist. Die Konfigurationen w und $-w$ haben identische Graphen.

Thermodynamische Potentiale

Jeder Gitterpunkt \bullet mit Spin -1 gibt einen Beitrag $2h$ zur Energie, jedes nächste Nachbarn-Paar $\bullet\circ$ einen Beitrag $2J$, also ist

$$E(X) = E_0 + 2J p(X) + 2h n(X). \tag{9.23}$$

Ist g_n die Vielfachheit der Anregungsenergie E_n , dann lautet die Zustandssumme

$$Z = e^{-\beta E_0} \sum_n g_n e^{-\beta(E_n - E_0)} = e^{\beta(PJ + Vh)} \Xi \tag{9.24}$$

und Ξ hat folgende Tieftemperaturentwicklung:

$$\Xi(z, \zeta) = \sum_{n=0}^{\infty} z^n F_V(n, \zeta) = \sum_{n=0}^{\infty} z^n \sum_{p=0}^{\infty} \zeta^p G_V(n, p). \quad (9.25)$$

Für eine ferromagnetische Kopplung $J > 0$ ist bei tiefen Temperaturen

$$\zeta = e^{-2\beta J} \ll 1 \quad (9.26)$$

und ζ darf als Entwicklungsparameter gewählt werden. Wir dürfen annehmen, dass h positiv ist, oder dass

$$z = e^{-2\beta h} < 1 \quad (9.27)$$

gilt. Dann ist der Grundzustand geordnet und die Mengen X, X' zu den Konfigurationen $w, -w$ haben verschiedene statistische Gewichte, nämlich

$$X : z^n \zeta^p \quad \text{und} \quad X' : z^{V-n} \zeta^p.$$

Im thermodynamischen Limes $V \rightarrow \infty$ verschwindet das Gewicht von X' relativ zu demjenigen von X . Dies ist der Grund dafür, dass man im thermodynamischen Limes für $h \downarrow$ eine spontane Magnetisierung erwarten kann. Setzt man dagegen $h = 0$ bei endlichem Volumen, dann verschwindet wegen $E(X) = E(X')$ der Mittelwert von s_x und es gibt keine Magnetisierung.

Man beachte, dass die Variablen z und ζ eine andere Bedeutung haben als im letzten Kapitel. Der Koeffizient $G_V(n, p)$ in (9.25) ist gleich der Anzahl Konfigurationen X mit Volumen $n(X) = n$ und Oberfläche $p(X) = p$. Die Reihe (9.25) kann auch als grosskanonische Zustandssumme eines *Gittergases* mit Wechselwirkung $2J$ zwischen NN-Paaren $\circ \bullet$ und chemischen Potential $\mu = -2h$ interpretiert werden.

Wie in der Hochtemperaturentwicklung muss man die auftretenden Graphen und ihre Anzahl bestimmen. Für das 2d-Ising-Modell sind die führenden Graphen

n	p	Graphen	Anzahl	$F_V(n, \zeta)$	
1	4		V	$V\zeta^4$	
2	6		$2V$	$2V\zeta^6$	
	8		$\frac{1}{2}V(V-5)$	$\frac{1}{2}V(V-5)\zeta^8$	
3	8		$2V$	$6V\zeta^8$	
			$4V$		
	10		$2V(V-8)$		$2V(V-8)\zeta^{10}$
	12		$\binom{V}{3} - 6V - 2V(V-8)$		$\frac{1}{6}(V^3 - 15V^2 + 62V)\zeta^{12}$

Die Analogie zu den Hochtemperaturgraphen ist leider nur ein 2-dimensionales Eigenheit. Wir werden darauf zurückkommen. Im Gegensatz zu Z existiert die freie Energiedichte im thermodynamischen Limes und wir machen den Ansatz

$$\Xi(z, \zeta) = \xi(z, \zeta)^V \quad \text{mit} \quad \xi(z, \zeta) = \sum_{n=0}^{\infty} z^n c_n(\zeta). \tag{9.28}$$

Der Vergleich der Koeffizienten von z^n in

$$\begin{aligned} \sum_{n=0}^{\infty} z^n F_V(n, \zeta) &= (1 + c_1 z + c_2 z^2 + \dots)^V \\ &= 1 + zVc_1 + z^2V \left(c_2 + \frac{1}{2}(V-1)c_1^2 \right) + \dots \end{aligned}$$

liefert die V -unabhängigen Koeffizienten c_n . Zum Beispiel ergibt sich für c_1, c_2, c_3 :

$$\begin{aligned} z^1 : \quad \zeta^4 = c_1 &\implies c_1 = \zeta^4 \\ z^2 : \quad 2\zeta^6 + \frac{1}{2}(V-5)\zeta^8 = c_2 + \frac{1}{2}(V-1)c_1^2 &\implies c_2 = 2\zeta^6 - 2\zeta^8 \\ z^3 : \quad 6\zeta^8 + 2(V-8)\zeta^{10} + \frac{1}{6}(V^2 - 15V + 62)\zeta^{12} \\ &= c_3 + (V-1)c_1c_2 + \frac{1}{6}(V-1)(V-2)c_1^3 \implies c_3 = 6\zeta^8 - 14\zeta^{10} + 8\zeta^{12} \end{aligned}$$

und damit

$$\xi(z, \zeta) = 1 + z\zeta^4 + z^2(2\zeta^6 - 2\zeta^8) + z^3\left(6\zeta^8 - 14\zeta^{10} + \frac{26}{3}\zeta^{12}\right) + \dots \quad (9.29)$$

Um die freie Energiedichte zu gewinnen, müssen wir die Logarithmus-Funktion in

$$f = -\frac{P}{V}J - h - \frac{1}{\beta} \log \xi \quad (9.30)$$

entwickeln. Da ξ von der Ordnung 1 und $F_V(n, \zeta)$ von der Ordnung V ist, folgt mit

$$\begin{aligned} \log \Xi &= V \log \xi = \log(1 + zF_V(1, \zeta) + z^2F_V(2, \zeta) + \dots) \\ &= \sum_{n=1}^{\infty} z^n F_V(n, \zeta) + O(V^2), \end{aligned}$$

dass sich die höheren Ordnungsterme in der Entwicklung der Logarithmusfunktion wegheben. Deshalb ist

$$\log \xi = \sum_{n=0}^{\infty} z^n g_n(\zeta), \quad g_n(\zeta) = \frac{d}{dV} F_V(n, \zeta) \Big|_{V=0}. \quad (9.31)$$

Für das 2d-Ising-Modell erhalten wir

$$\log \xi = z\zeta^4 + z^2\left(2\zeta^6 - \frac{5}{2}\zeta^8\right) + z^3\left(6\zeta^8 - 16\zeta^{10} + \frac{31}{3}\zeta^{12}\right) + \dots, \quad (9.32)$$

was man auch mit (9.29) erhält.

Magnetisierung

Die Magnetisierung gewinnen wir durch Ableiten der freien Energiedichte nach h ,

$$\begin{aligned} m(\beta, h) &= -\frac{\partial}{\partial h} f \stackrel{(9.30)}{=} 1 + \frac{1}{\beta} \frac{\partial}{\partial h} \log \xi \\ &= 1 - 2z \frac{\partial}{\partial z} \log \xi = 1 - 2 \sum_{n=1}^{\infty} n z^n g_n(\zeta). \end{aligned} \quad (9.33)$$

Die spontane Magnetisierung ist dann

$$m(\beta, h = 0) = 1 - 2 \sum_{n=1}^{\infty} n g_n(\zeta). \quad (9.34)$$

Wichtig ist, dass in 2 und mehr Dimensionen die minimale Oberfläche eines Graphen mit dem Volumen gegen unendlich strebt. Für $n = 9$ zum Beispiel ist der Graph mit *minimaler Oberfläche* das Quadrat mit Seitenlängen 3 ($p = 12$). Für jedes n besteht der Graph mit *maximale Oberfläche* aus n disjunkten Quadraten der Seitenlänge und hat die Oberfläche $p = 4n$. Deshalb hat die spontane Magnetisierung m_0 eine (formale) Potenzreihe in ζ . In einer Dimension oder für ein unendlich langes Gitter mit endlicher Breite gilt dies nicht. Es gibt dann Graphen fester Oberfläche mit beliebig großem Volumen.

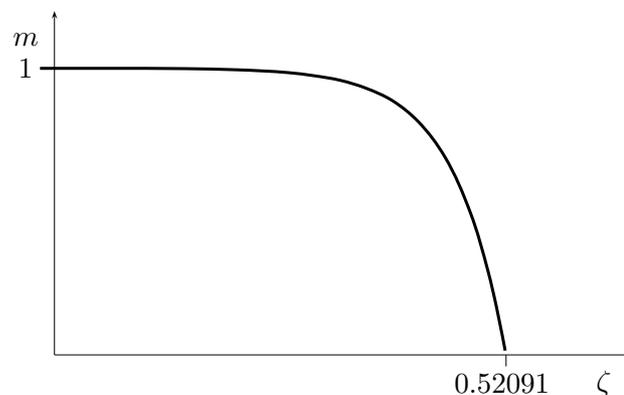
Für das 2d quadratische Ising-Modell sind

$$\begin{aligned}
 g_1 &= \zeta^4 \\
 2g_2 &= 4\zeta^6 - 5\zeta^8 \\
 3g_3 &= 18\zeta^8 - 48\zeta^{10} + 31\zeta^{12} \\
 4g_4 &= 4\zeta^8 + 72\zeta^{10} - 340\zeta^{12} + \dots \\
 5g_5 &= 40\zeta^{10} + 215\zeta^{12} + \dots \\
 6g_6 &= 12\zeta^{10} + 240\zeta^{12} + \dots \\
 7g_7 &= 154\zeta^{12} + \dots \\
 8g_8 &= 48\zeta^{12} + \dots \\
 9g_9 &= 9\zeta^{12} + \dots
 \end{aligned}$$

Zum Beispiel ist der Koeffizient $31/3$ von ζ^{12} in $g_3(\zeta)$ bestimmt als Koeffizient von V in der Zahl $G_V(3, 12)$ aller Graphen mit Volumen $n(X) = 3$ und Oberfläche $p(X) = 12$. Für die Summe in (9.34) finden wir

$$\sum n g_n(\zeta) = \zeta^4 + 4\zeta^6 + 17\zeta^8 + 38\zeta^{10} + 357\zeta^{12} + \dots \quad (9.35)$$

In der folgenden Abbildung ist die spontane Magnetisierung (9.34) geplottet.



Extrapolation zum kritischen Punkt

Die Extrapolation ergibt eine verschwindende Magnetisierung bei

$$\zeta_c = 0.52091 \quad \text{oder} \quad T_c = 3.06665 \cdot J \sim 0.76666 \cdot T_{\text{MF}}. \quad (9.36)$$

Die Tieftemperaturreihe für die Magnetisierung,

$$m_0 = \sum a_n y^n = 1 - 2y^2 - 8y^3 - 34y^4 - 152y^5 - 714y^6 + \dots, \quad (9.37)$$

mit $y = \zeta^2$ ist, hat bis auf a_0 nur negative Koeffizienten. Falls die Reihe einen endlichen Konvergenzradius y_c hat, so liegt die Singularität von $m_0(y)$ auf der positiven reellen Achse bei y_c . Wir analysieren die Reihe wie früher mit dem Quotientenkriterium.

$$m_0 \sim \left(1 - \frac{y}{y_c}\right)^\beta = \sum a_n y^n \implies \frac{a_n}{a_{n-1}} = \frac{1}{y_c} - \frac{1 + \beta}{y_c} \frac{1}{n}. \quad (9.38)$$

In [43] wurde die Tieftemperaturentwicklung für das 2d-Ising-Modell auf dem quadratischen Gitter bis zur Ordnung y^{76} berechnet. Die Koeffizienten und Koeffizientenquotienten bis zur Ordnung y^{15} sind in der folgenden Tabelle enthalten.

n	a_n	a_n/a_{n-1}	n	a_n	a_n/a_{n-1}	n	a_n	a_n/a_{n-1}
1	9		6	-714	4.69737	11	-2373048	5.22263
2	-2		7	-3472	4.86275	12	-12515634	5.27408
3	-8	4.00000	8	-17318	4.98790	13	-66551016	5.31743
4	-34	4.25000	9	-88048	5.08419	14	-356345666	5.35447
5	-152	4.47059	10	-454378	5.16056	15	-1919453984	5.38649

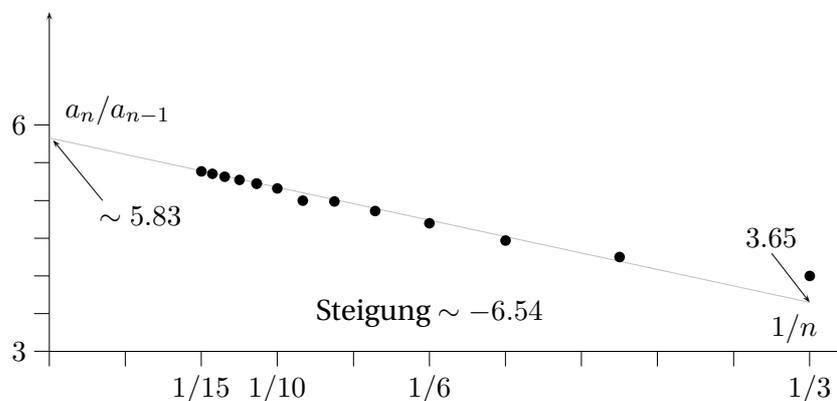
Die Quotienten a_n/a_{n-1} sind in der nächsten Abbildung über n aufgetragen. Die Steigung der interpolierenden Gerade ist etwa -6.54 und der Schnittpunkt mit der Ordinate bei $1/y_c \sim 5.83$. Daraus ergibt sich folgende Schätzung für die kritische Temperatur

$$\frac{1}{y_c} = e^{4\beta_c J} = 5.83 \implies T_c = 2.269 \cdot J = 0.567 \cdot T_{\text{MF}}. \quad (9.39)$$

Dies ist nahe am exakten Wert (9.19). Für den kritischen Koeffizienten β finden wir

$$\beta \sim 6.54/5.83 - 1 \sim 0.122. \quad (9.40)$$

anstelle des exakten Wertes $\beta = 1/8 = 0.125$.



9.3 Aufgaben

Aufgabe 14: Hochtemperaturentwicklung für das 3d-Isingmodell

Untersuchen sie die Graphen für die Hochtemperaturentwicklung der Zustandssumme des 3-dimensionalen Ising-Modells mit

$$H = -J \sum_{\langle xy \rangle} s_x s_y \quad \text{mit} \quad s_x, s_y \in \{-1, 1\}.$$

Die Anzahl NN-Paare ist $P = 3N$. Sie sollten folgende Reihe

$$Z = (\cosh K)^{3V} \cdot 2^V \cdot \left(1 + 3Vv^4 + 22Vv^6 + \frac{1}{2} \{9V(V-1) + 375V\} v^8 + \dots \right)$$

mit $v = \tanh(\beta J)$ erhalten. Geben Sie weiterhin für $e^{-\beta f}$ (f ist die Dichte der Freien Energie) die Entwicklung ebenfalls bis zur Ordnung v^8 an.

Kapitel 10

Einige exakte Resultate

In diesem Kapitel besprechen wir einige wichtige exakte Resultate über diskrete Gittermodelle. Wir beginnen mit den erstaunlichen Dualitätstransformationen, die zwei Gittermodelle ineinander transformieren. Diese Transformationen existieren auch für Abelsche Eichtheorien und einfache (supersymmetrische) Feldtheorien. Danach wird das Peierlsche Argument für die Existenz einer geordneten Phase in ferromagnetischen Systemen in 2 oder mehr Dimensionen bei tiefen Temperaturen besprochen. Nach einer Diskussion der hilfreichen Korrelationsungleichungen findet sich im Anhang eine kurze Einführung in den Differenzenkalkül auf Gittern, einer diskreten Version des äußeren Kalküls.

10.1 Dualität für das $2d$ Ising-Modell

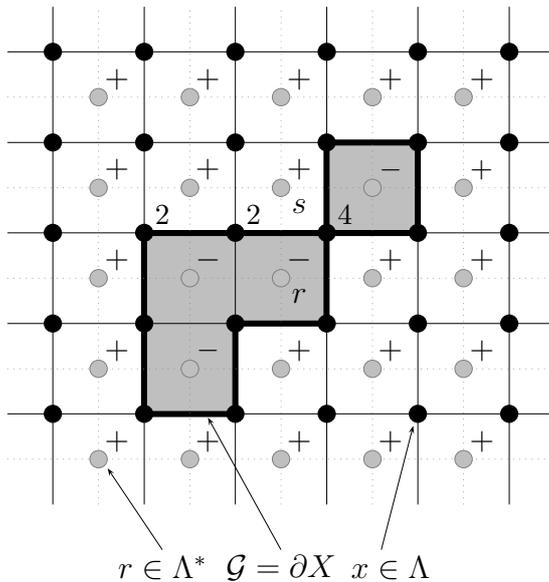
KRAMERS und WANNIER [46] fanden 1941 eine Transformation, welche das $2d$ -Ising-Modell mit $(\beta, h = 0)$ auf ein $2d$ -Ising-Modell mit $(\beta^*, h = 0)$ abbildet. Dabei ist die Temperatur T^* eine monoton abnehmende Funktion der Temperatur T des ursprünglichen Modells und die Hochtemperaturphase geht über in die Tieftemperaturphase. Diese interessante *Dualitätstransformation* führt auf neue Einsichten über die Dynamik des Ising-Modells. Sie kann auf beinahe alle Abelschen Theorien, auch in höheren Dimensionen, verallgemeinert werden. Zum Beispiel auf Theorien mit Symmetriegruppen $\mathbb{Z}_N, \mathbb{R}, U(1)$. Nicht immer ist die duale Theorie gleich der ursprünglichen mit anderen Parametern, d.h. nicht jede Abelsche Theorie ist selbstdual. Oft ist die duale Theorie wesentlich komplizierter als die ursprüngliche. Leider ist es viel schwieriger, Dualitätstransformationen für nicht-Abelsche Theorien zu finden. Eine schöne Einführung in Dualitäten in Feldtheorien und der statistischen Mechanik findet sich im Übersichtsartikel von R. SAVIT [44].

Wir beginnen mit der graphischen Entwicklung der Zustandssumme für hohe

Temperaturen,

$$\begin{aligned}
 Z &= (\cosh K)^P \sum_w \prod_{\langle xy \rangle} (1 + v s_x s_y) = (\cosh K)^P 2^V \sum_{\ell=0}^{\infty} g_\ell v^\ell \\
 &= (\cosh K)^P 2^V \sum_{\mathcal{G}} v^{L(\mathcal{G})} = (\cosh K)^P 2^V \sum_{\mathcal{G}} \prod_x v^{n_x(\mathcal{G})/2}, \tag{10.1}
 \end{aligned}$$

wobei \mathcal{G} die Menge der Hochtemperaturgraphen (geschlossene Graphen, Graphen mit lauter geraden Vertices) ist und $n_x(\mathcal{G})$ die Anzahl der am Vertex x endenden Linien des Graphen \mathcal{G} . In zwei Dimensionen ist $n_x \in \{0, 2, 4\}$. Nun kommt die wichtige Beobachtung, dass diese Summe als Zustandssumme auf dem *dualen Gitter* interpretiert werden kann.



Das duale Gitter Λ^* ist das Gitter mit Vertices in den Mittelpunkten der Zellen des ursprünglichen Gitters Λ . Die Variablen n_x sind auf den Punkten des Gitters Λ definiert. Nun können wir jedem Graphen duale Variablen $\sigma_r, r \in \Lambda^*$ wie folgt zuordnen: $\sigma_r \sigma_s = -1$ falls der Graph \mathcal{G} die Linie von r nach s auf dem dualen Gitter schneidet. Schneiden sie sich nicht, so setzen wir $\sigma_r \sigma_s = 1$. Der Graph \mathcal{G} definiert ein Gebiet X auf dem dualen Gitter. Spins σ_r „innerhalb“ und „außerhalb“ des Gebiets X haben verschiedene Vorzeichen.

Zu

jedem Graphen gehören 2 Konfigurationen w^* und $-w^*$ auf dem dualen Gitter. Es sei nun $p(x)$ die Plaquette des dualen Gitters mit dem Gitterpunkt $x \in \Lambda$ im Zentrum und den Eckpunkten 1, 2, 3 und 4. Dann ist

$$n_x = 2 - \frac{1}{2}(\sigma_1 \sigma_2 + \sigma_2 \sigma_3 + \sigma_3 \sigma_4 + \sigma_4 \sigma_1) \equiv 2 - \frac{1}{2} \sigma_{p(x)}. \tag{10.2}$$

Setzen wir dies in die Zustandssumme (10.1) ein und berücksichtigen, dass w^* und $-w^*$ zum selben Graphen gehören und jede duale Linie zu zwei Plaquetten gehört,

dann folgt

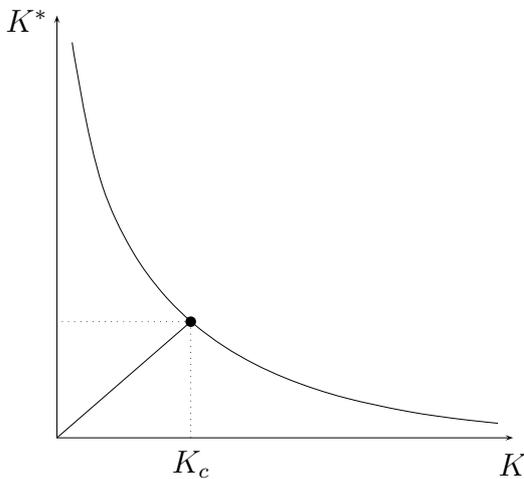
$$\begin{aligned}
 Z &= \frac{1}{2}(\cosh K)^P 2^V \sum_{w^*} \prod_x (v \cdot v^{-\sigma_P(x)/4}) \\
 &= \frac{1}{2}(\cosh K)^{2V} (2v)^V \sum_{w^*} v^{-\frac{1}{2} \sum_{\langle rs \rangle} \sigma_r \sigma_s} \\
 &= \frac{1}{2} (2 \sinh K \cosh K)^V \sum_{w^*} e^{-\beta^* H(\sigma)},
 \end{aligned} \tag{10.3}$$

wobei H die Energie des Ising-Modells ist und wir $v = \exp(-2K^*)$ beziehungsweise $K^* = -\frac{1}{2} \log \tanh K$ gesetzt haben. Diese Beziehung zwischen K und K^* kann wie folgt umgeformt werden,

$$2 \sinh 2K^* = e^{2K^*} - e^{-2K^*} = \frac{1}{v} - v = \coth K - \tanh K = \frac{2}{\sinh 2K}.$$

Die Beziehung zwischen K und K^* hat also die symmetrische Form

$$\sinh 2K \cdot \sinh 2K^* = 1. \tag{10.4}$$



Die Gleichung (10.4) sollte als Beziehung zwischen der Temperatur T des Ising-Modells auf dem Gitter Λ und der Temperatur T^* des Ising-Modells auf dem dualen Gitter Λ^* interpretiert werden. Die Beziehung $K \leftrightarrow K^*$ ist symmetrisch und reziprok: wenn K monoton von 0 nach ∞ wächst, so fällt K^* monoton von ∞ nach 0. Die Abbildung links zeigt die monoton fallende Funktion $K^*(K)$ und den Fixpunkt der Abbildung $K \rightarrow K^*$.

Weiterhin ist

$$\sinh K \cosh K = \frac{1}{2} \sinh 2K \implies (2 \sinh K \cosh K)^2 \stackrel{(10.4)}{=} \frac{\sinh 2K}{\sinh 2K^*}.$$

und wegen (10.3) führt dies auf die Dualitätsrelation

$$\frac{Z(K)}{(\sinh 2K)^{V/2}} = \frac{1}{2} \frac{Z(K^*)}{(\sinh 2K^*)^{V/2}}. \tag{10.5}$$

Wenn wir nun annehmen, dass die freie Energiedichte reell-analytisch ist für $T > 0$, bis auf eine *einzig*e kritische Temperatur T_c , dann ist K_c die Lösung der Gleichung $K = K^*$, also von

$$\sinh 2K_c = \pm 1 \implies K_c = \pm \frac{1}{2} \log(1 + \sqrt{2}) \approx \pm 0.4407.$$

Die negative Lösung entspricht dem antiferromagnetischen Fall $J < 0$. Für das ferromagnetische System ist die kritische Temperatur

$$T_c = \frac{2J}{\log(1 + \sqrt{2})} \approx 2.2692J \approx 0.5673 T_{\text{MF}}. \quad (10.6)$$

Hätte das Ising-Modell mehrere kritische Punkte, dann würde die Dualitätsrelation (10.5) nicht mehr alle kritischen Temperaturen bestimmen, sondern nur noch Relationen zwischen Paaren von kritischen Temperaturen.

Wir geben eine zweite, mehr algebraische Herleitung der Dualitätsrelation, welche sich leichter auf andere Systeme verallgemeinern lässt. Wir schreiben

$$Z = \sum_{\{s\}} \prod_{\langle xy \rangle} (\cosh K + \sinh K s_x s_y) = \sum_{\{s\}} \prod_{\langle xy \rangle} \sum_{k=0}^1 c_k(K) (s_x s_y)^k, \quad (10.7)$$

wobei $c_0(K) = \cosh K$ und $c_1(K) = \sinh K$ eingeführt wurden. Wir werden hier auf ein zweiwertiges Feld geführt, das jeder Linie $\ell = \langle xy \rangle$ die Zahl 0 oder 1 zuordnet,

$$k_\ell = k_{xy} \in \{0, 1\}.$$

Für eine feste Belegung $\{k\}$ der Links ist der Beitrag zur Zustandssumme

$$\begin{aligned} \sum_{\{s\}} \prod_{\langle xy \rangle} c_{k_{xy}}(K) (s_x s_y)^{k_{xy}} &= \prod_{\langle xy \rangle} c_{k_{xy}}(K) \sum_{\{s\}} \prod_{\langle xy \rangle} (s_x s_y)^{k_{xy}} \\ &= \prod_{\langle xy \rangle} c_{k_{xy}}(K) \sum_{\{s\}} \prod_x s_x^{\partial k(x)}, \end{aligned}$$

wobei $\partial k(x) = \sum_{y:\langle yx \rangle} k_{xy}$ eingeführt wurde. Für jede ganze Zahl k ist

$$\sum_{s_x = -1, 1} s_x^n = 2\delta_2(n), \quad \delta_2(n) = \begin{cases} 1 & \text{n gerade} \\ 0 & \text{n ungerade,} \end{cases} \quad (10.8)$$

und die Summe über die Spinkonfigurationen kann leicht ausgeführt werden. Damit

erhalten wir folgende Formel für die Zustandssumme in beliebigen Dimensionen

$$Z = 2^V \sum_{\{k\}} \prod_{\ell} c_{k_{\ell}}(K) \prod_x \delta_2(\partial k(x)). \quad (10.9)$$

Jede Linie $\ell = \langle xy \rangle$ auf dem Gitter ist mit einem $k_{\ell} \in \{0, 1\}$ belegt. Die Variable

$$\partial k(x) = \sum_{\ell: x \in \partial \ell} k_{\ell}$$

kann einen der Werte 0, 1, 2, 3 oder 4 annehmen. ∂k ist die Divergenz des „Vektorfeldes“ k_{ℓ} . Nun ordnen wir einer Belegung $\ell \rightarrow k_{\ell}$ der Linien zwischen nächsten Nachbarn eine Konfiguration $\{\sigma_r | r \in \Lambda^*\}$ mit $\sigma_r \in \{\pm 1\}$ auf dem dualen Gitter zu. Schneidet die Linie $\langle rs \rangle$ zwischen den nächsten Nachbarn r, s auf dem dualen Gitter die Linie ℓ , so setzen wir

$$k_{\ell} = \frac{1}{2}(1 - \sigma_r \sigma_s). \quad (10.10)$$

Für parallele Spins auf den Gitterplätzen r und s ist $k_{\ell} = 0$, für antiparallele Spins 1. Es folgt die Relation

$$\partial k(x) = 2 - \frac{1}{2} \sigma_p(x),$$

wobei $\sigma_p(x)$ in (10.2) eingeführt wurde. Die rechte Seite ist immer gerade, so dass alle δ -Bedingungen in (10.9) automatisch erfüllt sind. Die Transformation (10.10) liefert alle Belegungen der Links mit geraden Divergenzen.

Die Summe über die $\{k\}$ -Konfigurationen wird zur Summe über die Spinkonfigurationen auf dem dualen Gitter. Allerdings müssen wir dabei berücksichtigen, dass $\{\sigma\}$ und $\{-\sigma\}$ zur selben $\{k\}$ -Konfiguration gehören. Da zu jeder Linie ℓ genau eine Linie $\langle rs \rangle$ auf dem dualen Gitter gehört, ist das Produkt über alle ℓ gleich dem Produkt über alle nächste Nachbarn Paare $\langle rs \rangle$ auf dem dualen Gitter und

$$Z = \frac{1}{2} 2^V \sum_{\{\sigma\}} \prod_{\langle rs \rangle} c_{(1 - \sigma_r \sigma_s)/2}(K)$$

Nun formen wir $c_k(K)$ noch um:

$$\begin{aligned} c_k(K) &= \cosh K e^{k \log \tanh K} \\ &\stackrel{(10.10)}{=} (\cosh K \sinh K)^{1/2} \exp\left(-\frac{1}{2} \sigma_r \sigma_s \log \tanh K\right). \end{aligned}$$

Eingesetzt ergibt sich

$$\begin{aligned} Z &= \frac{1}{2} (2 \cosh K \sinh K)^V \sum_{\{\sigma\}} \exp \left(-\frac{1}{2} \log \tanh K \sum_{\langle rs \rangle} \sigma_r \sigma_s \right) \\ &= \frac{1}{2} (\sinh 2K^*)^{-V} \sum_{\{\sigma\}} \exp \left(K^* \sum_{\langle rs \rangle} \sigma_r \sigma_s \right) \end{aligned} \quad (10.11)$$

mit $K^* = -\frac{1}{2} \log \tanh K$. Wir finden also wieder unser früheres Resultat mit allen Konsequenzen.

Die letzte Umschreibung der Zustandssumme lässt sich nun relativ leicht verallgemeinern um die Frage nach der Interpretation der Variablen σ_r auf dem dualen Gitter zu beantworten. Dazu berechnen wir die *Zweipunktfunktion* des dualen Modells,

$$\langle \sigma_r \sigma_s \rangle = \frac{1}{Z^*} \sum_{\{\sigma\}} \sigma_r \sigma_s \exp \left(K^* \sum_{\langle pq \rangle} \sigma_p \sigma_q \right).$$

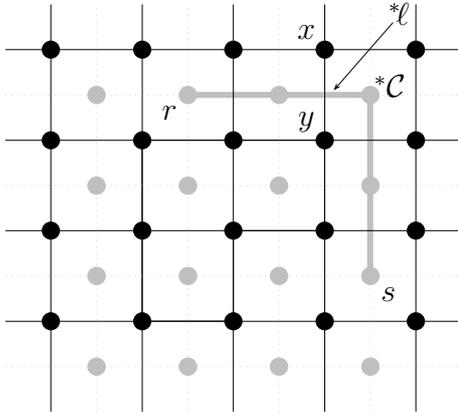
Die Zustandssumme $Z(K^*)$ im Nenner wurde schon „dualisiert“ und braucht nicht weiter betrachtet zu werden. Wir schreiben den Zähler um,

$$\begin{aligned} Z_{rs} &= \sum_{\{\sigma\}} \sigma_r \sigma_s \exp \left(K^* \sum_{\langle pq \rangle} \sigma_p \sigma_q \right) \\ &= \sum_{\{\sigma\}} \sigma_r \sigma_s \prod_{\langle pq \rangle} \sum_{k=0}^1 c_k(K^*) (\sigma_p \sigma_q)^k, \end{aligned}$$

wobei das Produkt über alle nächste Nachbarn-Paare auf Λ^* zu nehmen ist. Die weitere Rechnung ist eine leichte Modifikation der obigen Manipulation und ergibt

$$Z_{rs} = 2^V \sum_{\{k\}} \prod_{* \ell} c_{k_{*\ell}}(K^*) \delta_2(1 + \partial k(r)) \delta_2(1 + \partial k(s)) \prod_p' \delta_2(\partial k(p)), \quad (10.12)$$

wobei der Strich am letzten Produktzeichen das Produkt über alle Gitterpunkte des dualen Gitters mit Ausnahme von r und s anzeigen soll. Wir möchten wieder eine Darstellung der k finden, so dass die Bedingungen an die Divergenz ∂k in (10.12) erfüllt sind. Die Darstellung (10.10) erfüllt diese Forderung nicht.



Um zu einer Darstellung zu gelangen, verbinden wir die Punkte r und s mit einem beliebigen Weg ${}^*\mathcal{C}$ auf dem dualen Gitter. Dann wählen wir folgende Darstellung für die k :

$$k_{*l} = \begin{cases} \frac{1}{2}(1 - s_x s_y) & *l \notin {}^*\mathcal{C} \\ \frac{1}{2}(1 + s_x s_y) & *l \in {}^*\mathcal{C}. \end{cases}$$

Fall also $\langle xy \rangle$ den Weg ${}^*\mathcal{C}$ schneidet, so wählen wir eine andere Transformationsregel.

Mit dieser Darstellung ist ∂k auf allen Gitterplätzen von Λ^* eine gerade Zahl, mit Ausnahme der Punkte r, s , wo ∂k ungerade ist. Eingesetzt in (10.12) erhalten wir

$$Z_{rs} = \frac{1}{2} 2^V \sum_{\{s\}} \prod_{\langle xy \rangle \in \mathcal{C}} c_{(1+s_x s_y)/2}(K^*) \prod_{\langle xy \rangle \notin \mathcal{C}} c_{(1-s_x s_y)/2}(K^*)$$

wobei \mathcal{C} die Menge aller Kanten auf dem Gitter Λ ist, die den Weg ${}^*\mathcal{C}$ schneiden. Nach einer ähnlichen Umformung wie oberhalb von (10.11) gelangen wir zu folgender Darstellung

$$Z_{rs} = \frac{1}{2} (\sinh 2K)^{-V} \sum_{\{s\}} \exp \left(\sum_{\langle xy \rangle} K_{xy} s_x s_y \right). \quad (10.13)$$

Im Exponenten wird über alle nächste-Nachbarn Paare auf Λ summiert. Die Kopplung zwischen nächsten Nachbarn ist βJ , außer für nächste Nachbarn deren Verbindungslinie den Weg ${}^*\mathcal{C}$ auf dem dualen Gitter von r nach s schneidet. Für diese speziellen Paare ist die Kopplung $-\beta J$ antiferromagnetisch. Damit ist Z_{rs} die Zustandssumme eines Ising-Modells mit einer Mischung aus ferromagnetischen und antiferromagnetischen Kopplungen zwischen nächsten Nachbarn. Die Korrelationsfunktion $\langle \sigma_r \sigma_s \rangle$ ist das Verhältnis von zwei Zustandssummen: einer mit gemischten ferro- und antiferromagnetischen Kopplungen und einer mit nur ferromagnetischen Kopplungen.

10.2 Dualität für das 3d Ising-Modell

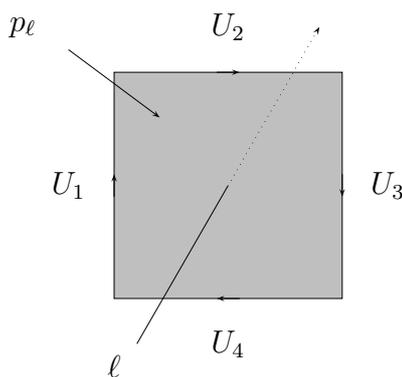
Wir beginnen wie bei der Transformation des 2-dimensionalen Modells und erinnern an das in beliebigen Dimensionen gültige Resultat (10.9)

$$Z = 2^V \sum_{\{k\}} \prod_{\ell} c_{k_{\ell}}(K) \prod_x \delta_2(\partial k(x)). \tag{10.14}$$

Wiederum gibt es eine Variable k pro Kante, und entsprechend erhält man in 3 Dimensionen die Divergenz

$$(\partial k)(x) = \sum_{\ell: x \in \partial \ell} k_{\ell}. \tag{10.15}$$

Sie ist nun die Summe von 6 Termen, ein k für jede von x ausgehende Linie. Nun ist es schwieriger, die Bedingung $\partial k(x) \in \{0, 2, 4, 6\}$ in (10.14) zu erfüllen. Zuerst führen wir wieder das duale Gitter Λ^* ein. Die Gitterpunkte von Λ^* sind die Zentren der Elementarzellen des ursprünglichen Gitters. Zwei Punkte auf dem dualen Gitter werden mit einer Linie verbunden (sind nächste Nachbarn) wenn die entsprechenden Elementarzellen eine Seite teilen. Das duale Gitter eines kubischen Gitters ist damit wieder ein kubischen Gitter, das in alle drei Raumrichtungen um eine halbe Gitterlänge gegenüber Λ verschoben ist. Jede Kante ℓ des ursprünglichen Gitters geht durch genau eine elementare Plaquette (Seite) des dualen Gitters. Dies ist die zu ℓ duale Plaquette p_{ℓ} . Wir ordnen nun jeder Kante ${}^*\ell$ des dualen Gitters eine Variable (Linkvariable) $U_{* \ell} \in \{-1, 1\}$ zu.



Es sei p_{ℓ} die zur Kante ℓ duale Plaquette. Wir schreiben

$$k_{\ell} = \frac{1}{2} \left(1 - \prod_{* \ell \in \partial p_{\ell}} U_{* \ell} \right) \tag{10.16}$$

Haben eine gerade Anzahl von gruppenwertigen $U_{* \ell}$ auf dem Rand der Plakette p den Wert 1, dann ist $k_{\ell} = 0$, sonst $k_{\ell} = 1$.

Nun betrachten wir die Divergenz von ∂k am Gitterpunkt x . Sie ist gleich der Summe der k -Werte aller 6 Kanten, die bei x beginnen. Es sei K_x der Kubus des dualen Gitters mit Mittelpunkt x . Durch jede Seite (Plaquette) dieses Kubus geht eine bei x beginnende Kante. Die zu diesen 6 Kanten ℓ dualen Plaquetten sind offensichtlich die 6

Seiten des Kubus und

$$\partial k(x) = 3 - \frac{1}{2} \sum_{*p \in \partial K_x} \prod_{*\ell \in \partial *p} U_{*\ell}. \quad (10.17)$$

Das Produkt der U 's kann nur die Werte ± 1 annehmen. Wir wollen nachprüfen, dass für diese Darstellung die Divergenz nur die Werte 0, 2, 4 und 6 annehmen kann. Sind alle $U_{*\ell}$ auf den Kanten des Kubus 1, so ist $\partial k = 0$. Ändern wir das Vorzeichen eines der $U_{*\ell}$, so ändern 2 Terme in (10.17) das Vorzeichen und die Summe ändert sich entsprechend um 4, 0 oder -4 . Also ändert sich ∂k um eine gerade Zahl. Das die Darstellung (10.16) notwendig ist, werden wir später beweisen.

Das Produkt über alle Kanten (10.14) wird zum Produkt über alle dualen Plaquetten. Setzen wir die Darstellung (10.17) in (10.14) ein, so sind die Kronecker-Funktionen alle 1 und

$$Z = 2^V \sum_{\{k(U)\}} \prod_{\{*p\}} c_{(1 - \prod U_{*\ell})/2}(K). \quad (10.18)$$

Wir werden sehen, dass verschiedene Konfigurationen $U : *\ell \rightarrow U_{*\ell} \in \{-1, 1\}$ zu derselben Konfiguration $k : \ell \rightarrow k_\ell \in \{0, 1\}$ gehören. Nach Konstruktion ist das Gewicht zweier U -Felder mit identischem k -Feld gleich. Wir dürfen also nur über Klassen $k(U)$ von U -Feldern summieren, welche zum selben k -Feld gehören. Dies ist die Summe in (10.18). Mit der Beziehung

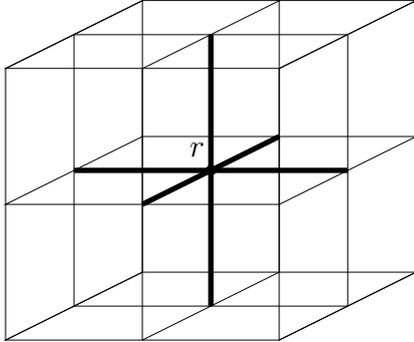
$$\begin{aligned} c_{k_\ell} &= \cosh K e^{k_\ell \log \tanh K} \\ &\stackrel{(10.16)}{=} (\cosh K \sinh K)^{1/2} \exp \left(-\frac{1}{2} \log \tan K \prod_{*\ell \in \partial_p \ell} U_{*\ell} \right) \end{aligned}$$

ergibt sich folgende Form für die Zustandssumme,

$$Z = 2^V (\cosh K \sinh K)^{3V/2} \cdot \sum_{\{k(U)\}} \exp \left(K^* \sum_{\{*p\}} \prod_{*\ell \in \partial *p} U_{*\ell} \right) \quad (10.19)$$

Die Summe im Exponenten ist über alle Plaquetten des dualen Gitters und die Beziehung $K^*(K)$ lautet genauso wie in 2-Dimensionen,

$$K^* = -\frac{1}{2} \log \tanh K. \quad (10.20)$$



Multiplizieren wir die $U_{*\ell}$ derjenigen Kanten $*\ell$, deren Rand den Punkt $r \in \Lambda^*$ enthält mit -1 , so ändert sich das Feld $k(U)$ in (10.16) nicht, da jede Plaquette des dualen Gitters entweder zwei oder keine dieser Kanten enthält. Diese Operation kann an jedem Gitterpunkt $r \in \Lambda^*$ unabhängig vorgenommen werden, und daher gibt es 2^{V^*} Konfigurationen $\{U\}$ mit demselben $k(U)$.

Es folgt, dass unter einer *Umeichung*

$$U_{\langle rs \rangle} \longrightarrow U'_{\langle rs \rangle} = g_r U_{\langle rs \rangle} g_s^{-1}, \quad g : \Lambda^* \longrightarrow \mathcal{G} = \{-1, 1\} \quad (10.21)$$

sich weder das Feld $k(U)$ noch der Term

$$\prod_{*\ell \in \partial^* p} U_{*\ell}$$

im Exponent in (10.19) ändern. Es sind Beispiele für eichinvariante Größen. Andere wichtige eichinvariante Variablen sind die Wilsonschleifen-Variablen: Es sei $*\mathcal{C}$ ein geschlossener Weg (ein Schleife) auf dem dualen Gitter, $\partial^* \mathcal{C} = 0$. Dann ist die Schleifenvariable gegeben durch

$$W(*\mathcal{C}) = \prod_{\ell \in *\mathcal{C}} U_{*\ell} \in \mathcal{G}. \quad (10.22)$$

Zwei Konfigurationen U und U' müssen in der Summe (10.19) identifiziert werden. Die Theorie mit Zustandssumme (10.19) hat damit eine *lokale Symmetrie*. Da $g : \Lambda^* \rightarrow \mathbb{Z}_2$ ein beliebiges Feld ist, gibt es 2^{V^*} eichäquivalente Konfigurationen U . Wir haben damit bewiesen, dass die zum 3-dimensionalen Ising-Modell duale Theorie eine \mathbb{Z}_2 -Eichtheorie ist. Man kann nun zeigen (siehe [44]), dass die duale Theorie der \mathbb{Z}_2 -Eichtheorie wieder das 3-dimensionale Ising-Modell ist. Die Dualitätstransformation ist idempotent.

Es stellt sich natürlich die Frage, wie man die Summe in (10.19) über eich-inäquivalente Konfiguration, also Konfigurationen U mit unterschiedlichen $k(U)$ ausführt. Es gibt zwei Vorgehensweisen: Man versucht die Eichung zu fixieren und wählt aus jeder

Eichklasse

$$\{U_{\langle rs \rangle}\} \sim \{g_r U_{\langle rs \rangle} g_s^{-1}\} \quad (10.23)$$

einen Repräsentanten aus und summiert nur über die Repräsentanten. Oder man summiert einfach über alle U -Konfigurationen in (10.19). Dann überzählt man, aber die Überzählung ist unabhängig von k immer (etwa) 2^{V^*} . Auf diese Weise findet man für kubische Gitter, für die $V = V^*$ ist, das Resultat

$$Z = (\cosh K \sinh K)^{3V/2} \cdot \sum_{\{U\}} \exp \left(K^* \sum_{\{^*p\}} \prod_{*\ell \in \partial^* p} U_{*\ell} \right). \quad (10.24)$$

Wir haben benutzt, dass der Boltzmannfaktor auf jeder Eichklasse konstant ist. Nun schreiben wir die Eichtransformation (10.21) noch in einer Form, die den Zusammenhang zur Elektrodynamik (in 3 Euklidischen Raumzeit-Dimensionen) herstellt. Dazu schreiben wir

$$U_{\langle rs \rangle} = \exp(i\pi A_{\langle rs \rangle}) \quad \text{und} \quad g_r = \exp(i\pi \lambda_r),$$

wobei die Variablen $A_{\langle rs \rangle}$ und λ_x aus der additiven geschriebenen Gruppe $\mathbb{Z}_2 = \{0, 1\}$ sind. In dieser Gruppe ist zum Beispiel $1 + 1 = 0$. Wegen

$$\partial \langle rs \rangle = \langle s \rangle - \langle r \rangle \implies (\lambda, \partial \langle rs \rangle) = \lambda_s - \lambda_r = (d\lambda, \langle rs \rangle)$$

hat die Eichtransformation (10.21) für das Eichfeld $A = A_{\langle rs \rangle} \langle rs \rangle$ die uns allen wohlbekannte Form wie in der (diskretisierten) Elektrodynamik,

$$A \longrightarrow A' = A - d\lambda, \quad A \in C_1(\Lambda^*, \mathbb{Z}_2), \quad \lambda \in C_0(\Lambda^*, \mathbb{Z}_2). \quad (10.25)$$

10.3 Peierls Argument

Schon vor der Berechnung der freien Energie des 2-dimensionalen Ising-Modells durch ONSAGER [47] bewies PEIERLS [45] die Existenz zweier Phasen für tiefe Temperaturen. Seine von ihm verwendete Methode ist auf viele andere Modelle der statistischen Physik anwendbar. In diesem Abschnitt wird das Peierlsche Argument für das 2-dimensionale Ising-Modell besprochen. Am Ende werden wir klären, welche Verallgemeinerungen möglich sind.

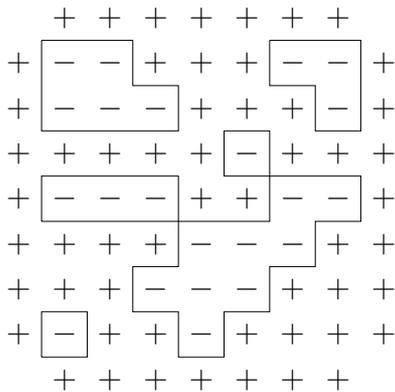
Wir wählen feste Randbedingungen und setzen alle Spins am Gitter-Rand auf 1. Die Wahl von nicht-periodischen Randbedingungen wird sich später als wichtig herausstellen. Mit den gewählten 1-Randbedingungen gehört zu jeder Konfiguration w

eine Menge Γ_w von sich nicht schneidenden Schleifen innerhalb derer die Spins -1 sind. Es sei also

$$\Gamma_w = \{\gamma_1, \gamma_2, \dots, \gamma_n\}$$

eine Menge von durchschnittsfreien Schleifen und w_Γ die zugehörige *eindeutige* Spin-konfiguration, siehe die folgende Abbildung. Es gibt $\sum_i |\gamma_i|$ NN-Paare mit antiparallelen Spins.

Wir wollen nun die Energie einer Konfiguration w_Γ mit zugehörigen Schleifen Γ_w und die Wahrscheinlichkeit für das Auftreten dieser Konfiguration abschätzen.



Die Energie $H = -J \sum_{\langle xy \rangle} s_x s_y$ dieser Konfiguration ist offensichtlich

$$\begin{aligned} H_\Lambda(w_\Gamma) &= -J \#(\text{Paare mit gleichem Spin}) \\ &\quad + J \#(\text{Paare mit ungl. Spin}) \\ &= -JP + 2J \sum_i |\gamma_i|, \end{aligned}$$

wobei wie früher P die Anzahl NN-Paare und $|\gamma_i|$ die Länge der Schleife γ_i bezeichnet.

Damit ist die Wahrscheinlichkeit für das Auftreten einer Konfiguration w_Γ gleich

$$P[w_\Gamma] = \frac{1}{Z'} \exp\left(-2K \sum_{\gamma_i \in \Gamma_w} |\gamma_i|\right), \quad Z' = \sum_{\Gamma} \exp\left(-2K \sum_{\gamma_i \in \Gamma} |\gamma_i|\right). \quad (10.26)$$

Es gilt die folgende Ungleichung

Lemma (Peierls-Ungleichung) Die Wahrscheinlichkeit für das Auftreten einer Schleife γ kann wie folgt abgeschätzt werden,

$$P[\gamma] \equiv P[\{w : \gamma \in \Gamma_w\}] \leq e^{-2K|\gamma|}. \quad (10.27)$$

Beweis: Die linke Seite ist

$$\begin{aligned} \frac{1}{Z'} \sum_{w: \gamma \in \Gamma_w} \exp\left(-2K \sum_{\gamma' \in \Gamma_w} |\gamma'|\right) &= \frac{1}{Z'} e^{-2K|\gamma|} \sum_{w: \gamma \in \Gamma_w} \exp\left(-2K \sum_{\gamma' \in \Gamma_w \setminus \gamma} |\gamma'|\right) \\ &= \frac{1}{Z'} e^{-2K|\gamma|} \sum_{w: \gamma \in \Gamma_{P_\gamma w}} \exp\left(-2K \sum_{\gamma' \in \Gamma_w} |\gamma'|\right). \end{aligned}$$

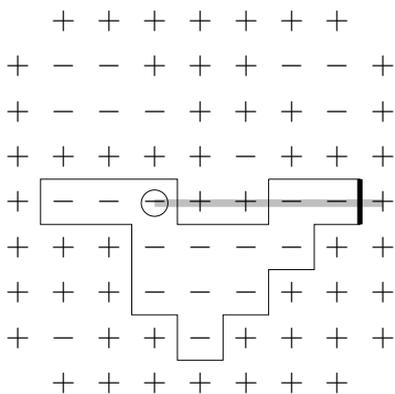
Wir haben benutzt, dass die Schleifen in Γ_w mit $\gamma \in \Gamma_w$ bis auf die Wegnahme von γ identisch zu den Schleifen der Konfiguration $P_\gamma w$ ist, wobei $P_\gamma w$ aus w durch das Umkehren der Vorzeichen aller Spins innerhalb γ hervorgeht. In der letzten Summe wird über eine Teilmenge aller Konfigurationen summiert, so dass sie kleiner oder gleich Z' ist. Dies beweist dann die Ungleichung (10.27). Die Wahrscheinlichkeit für das Auftreten langer Konturen sinkt also exponentiell mit ihrer Länge. Diese Ungleichung ist unabhängig von der Größe des Gitters Λ .

Wir wollen diese Information dazu benutzen, um die Wahrscheinlichkeit der Spin-konfigurationen mit $s_x = -1$ für 1-Randbedingungen abzuschätzen. Dazu bemerken wir, dass jeder solche Spin von mindestens einer Kontur umschlossen sein muss (es können natürlich auch mehr sein). Wir haben das

Lemma Die Länge $|\gamma|$ jeder Kontur ist gerade. Die Anzahl $A(n)$ der einen Punkt $x \in \Lambda$ umschließenden Konturen der Länge n ist nach oben beschränkt durch

$$A(n) \leq \frac{n-2}{2} \cdot 3^{n-1}.$$

Für einen geschlossenen Kontur ist sowohl die Zahl der horizontalen als auch die Zahl der vertikalen Kanten gerade. Deshalb ist $n = |\gamma| \in \{4, 6, 8, \dots\}$.



Zur Abschätzung von $A(n)$ überlegen wir uns zunächst, dass der vom Punkt x ausgehende Strahl $y = x + \lambda e_1$, $\lambda > 0$, den Kontur γ mindestens einmal schneiden muss. Wir betrachten die vertikale Kante von γ mit dem größten λ -Wert. Diese kann nur λ -Werte der Form $-\frac{1}{2} + k$ mit $k \in \{1, \dots, \frac{1}{2}(n-2)\}$ besitzen. Der größte Wert wird für das Rechteck der Höhe 1 und Länge $\frac{1}{2}(n-2)$ realisiert. Jede der $n-1$ anderen Kanten kann bezüglich seines Vorgängers höchstens 3 Richtungen einschlagen:

links, geradeaus, rechts. Durch Multiplikation der kombinatorischen Faktoren erhalten wir die obige Schranke für $A(n)$. Die Zahl der x umschließenden Konturen wächst also exponentiell mit der Länge. Aus der Peierls-Ungleichung und dem obigen Lemma folgt durch Vergleich, dass für

$$K > \frac{1}{2} \log 3 \approx 0.55$$

das Auftreten sehr langer, den Punkt x umschließender Konturen unwahrscheinlich

ist. Es gilt der

Satz Für $K > 0.7$ existieren zwei verschiedene Gibbsmasse P_β^+, P_β^- für das Isingmodell auf dem Gitter \mathbb{Z}^2 , wobei für alle $x \in \mathbb{Z}^2$ gilt

$$\langle s_x \rangle_{P_\beta^+} > 0 \quad \text{und} \quad \langle s_x \rangle_{P_\beta^-} < 0. \quad (10.28)$$

Für tiefe Temperaturen tritt also spontane Magnetisierung auf. Aus der exakten Lösung oder den Dualitätsargumenten folgt, dass schon für $K > K_c$ mit $K_c = \frac{1}{2} \log(1 + \sqrt{2}) \approx 0.44$ spontane Magnetisierung auftritt.

Zum Beweis schätzen wir die Wahrscheinlichkeit für das Auftreten von $s_x = -1$ bei +1-Randbedingungen ab. Wir wollen annehmen, dass $\alpha \equiv 4K - 2 \log 3$ positiv ist:

$$\begin{aligned} P^+[s_x = -1] &\leq \sum_{\gamma \text{ um } x} P[\gamma] \leq \sum_{n \in \mathbb{N}} A(n) e^{-2Kn} = \sum_{m \in \mathbb{N}} A(2m) e^{-4Km} \\ &\leq \sum_{m \in \mathbb{N}} (m-1) 3^{2m-1} e^{-4Km} = \frac{1}{3} \sum_{m \in \mathbb{N}} (m-1) e^{-\alpha m} \\ &= \frac{1}{3} e^{-\alpha} \sum_{n \in \mathbb{N}_0} n e^{-n\alpha} = \frac{1}{3} e^{-\alpha} \left(-\frac{\partial}{\partial \alpha} \sum_{n \in \mathbb{N}_0} e^{-n\alpha} \right) = \frac{1}{3} \frac{y^2}{(1-y)^2}, \end{aligned}$$

mit $y = e^{-\alpha} \in (0, 1)$. Wir wollen herausfinden, wann diese Wahrscheinlichkeit kleiner als $\frac{1}{2}$ ist. Sie ist $\frac{1}{2}$ für

$$2y^2 = 3(1-y)^2 \quad \text{oder für} \quad y = 3 \pm \sqrt{6}.$$

Wir schliessen, dass für $y < 3 - \sqrt{6}$ oder auch für $\alpha > -\log(3 - \sqrt{6})$ die Wahrscheinlichkeit $P[s_x = -1]$ kleiner $1/2$ wird. Damit finden wir für +1-Randbedingungen und für

$$\beta J = K > \frac{1}{2} \log 3 - \frac{1}{4} \log(3 - \sqrt{6}) = \frac{1}{4} \log(3(3 + \sqrt{6})) \approx 0.69853. \quad (10.29)$$

eine positive Magnetisierung. Diese Abschätzung ist unabhängig vom Gitterplatz x und der Größe des Gitters. Im thermodynamischen Limes bleibt also für hinreichend tiefe Temperaturen eine positive Magnetisierung $\langle s_x \rangle^+ > 0$ übrig. Setzen wir alle Spins auf dem Rand gleich -1 , dann finden wir mit ähnlichen Argumenten, dass für $K > \frac{1}{4} \log[3(3 + \sqrt{6})]$ die Wahrscheinlichkeit $P[s_x = 1]$ kleiner als $1/2$ ist. Im thermodynamischen Limes erhalten wir dann eine negative Magnetisierung. Dies beweist die Existenz von mindestens zwei verschiedenen Phasen für $K > 0.7$.

Nun wollen wir uns überlegen, inwieweit sich das Peierls-Argument auf andere Systeme anwendbar ist. Beim Argument studiert man Anregungen über der Konfigu-

ration w_0 mit der kleinsten Energie, der sogenannten Grundzustandskonfiguration. Für das d -dimensionale Ising-Modell mit $+1$ -Randbedingungen ist dies die geordnete Konfiguration

$$w_0 = \{s_x = 1 | x \in \Lambda\}.$$

Daneben braucht man die Verallgemeinerung der *Peierlskonturen*. Dies sind randlose $d - 1$ -Ketten auf dem dualen Gitter,

$$\gamma \in C_{d-1}(\Lambda^*, \mathcal{G}), \quad \partial\gamma = 0.$$

Für jede Konfiguration $w = \{s\}$ definiert man diese Peierlskonturen wie folgt:

$$\Gamma_w = {}^*v_{d-1}^1 + {}^*v_{d-1}^2 + \dots,$$

wobei die Zellen ${}^*v_{d-1}^i$ auf dem dualen Gitter Λ^* dual zu einer Kante $\langle xy \rangle$ auf dem Gitter Λ sind, für die $s_x s_y = -1$ ist. Die Zellen ${}^*v_{d-1}^i$ bilden eine geschlossene (randlose) Fläche die im Allgemeinen aus mehreren Zusammenhangskomponenten $\{\gamma_1, \dots, \gamma_n\}$ besteht. Diese Komponenten nennt man Peierlskonturen. Eine Kontur ist also eine zusammenhängende und geschlossene Hyperfläche auf dem dualen Gitter. Sie trennt das Innere $\bar{\gamma} \subset \Lambda$ von seinem Komplement $\bar{\gamma}^c = \Lambda \setminus \bar{\gamma}$, dem Äusseren von γ . Zwei Konturen heissen verträglich, falls ihre Vereinigung keine zusammenhängende Menge von $d - 1$ -Ketten ist. Eine Menge von Konturen heisst verträglich, falls je zwei Konturen in der Menge verträglich sind. Es gibt offensichtlich eine $1 - 1$ -Beziehung zwischen Konfigurationen w mit $+1$ -Randbedingungen und Mengen von verträglichen Konturen. Wir finden folgende Abschätzungen für das d -dimensionale Ising-Modell:

Lemma Die Anzahl $A(n)$ der verschiedenen Peierlskonturen der Größe n erfüllt die Ungleichung

$$\exp\left(\frac{n - 2d}{2d - 2} \log d\right) < A(n) < \frac{n - 2}{2d - 2} (3(2d - 3))^{n-1}. \quad (10.30)$$

Die untere Schranke ist leicht zu beweisen: Man betrachte eine Kette von k benachbarten Gitterpunkten die bei x beginnt. Dabei gelangt man von einem Gitterpunkt zum folgenden indem man eine Gitterlänge in eine der d positiven Koordinatenrichtungen fortschreitet. Offensichtlich erhält man d^{k-1} verschiedene Ketten dieser Art. Nun betrachtet man die dazu duale d -Kette. Deren Rand ist eine zusammenhängende geschlossene Kontur die x umschließt. Die Größe jeder Kontur ist $n = (2d - 2)k + 2$,

da sich die inneren Flächen der Kettenzellen wegheben. Damit finden wir

$$A(n) > d^{k(n)-1} = d^{(n-2d)/(2d-2)} = \exp\left(\frac{n-2}{2d-2} \log d\right).$$

Wir beweisen die obere Schranke in (10.30) mit ähnlichen Argumenten wie wir sie für das 2-dimensionale Modell benutzten. Der von $x \in \Lambda$ ausgehende Strahl $x + \lambda e_1$, $\lambda > 0$ schneidet eine x umschliessende Kontur γ mindestens einmal. Wir betrachten die duale Zelle ${}^*v_{d-1}^1 \in \gamma$ mit dem größten λ -Wert. Diese kann nur λ -Werte der Form $-\frac{1}{2} + k$ mit $k \in \{1, \dots, (n-2)/(2d-2)\}$ annehmen. Der größte Wert wird für die Säule mit Grundfläche 1 und der Länge $(n-2)/(2d-2)$ in die e_1 -Richtung realisiert. Jede der $n-1$ anderen Zellen ${}^*v_{d-1}^i$, $i = 2, \dots, n$ kann bezüglich seiner Vorgängerzelle höchstens 3 Richtungen einschlagen und an $2(d-1) - 1$ Seiten angeheftet werden. Multipliziert man die kombinatorischen Faktoren, dann findet man die obere Schranke in (10.30).

Nun argumentiert ganz ähnlich wie in 2 Dimensionen. Dabei nehmen wir an, dass $\alpha = 4K - 2 \log(6d-9)$ positiv ist. Die Wahrscheinlichkeit, dass der Spin am Gitterpunkt x gleich -1 ist, kann wie folgt nach oben abgeschätzt werden:

$$P^+[s_x = -1] \leq \sum_{m \in \mathbb{N}} A(2m) e^{-4Km} \leq \frac{1}{\zeta^2} \frac{y^2}{(1-y)^2}$$

mit $y = e^{-\alpha}$, $\zeta^2 = 3(2d-3)(d-1)$.

Diese Wahrscheinlichkeit ist kleiner als $1/2$ für

$$y < \frac{\zeta}{\zeta + \sqrt{2}} \quad \text{oder} \quad K > \frac{1}{4} \log \left(1 + \frac{\sqrt{2}}{\zeta} \right) + \frac{1}{2} \log 3(2d-3).$$

In 2 Dimensionen ist $\zeta = \sqrt{3}$ und wir finden das frühere Resultat. In 3 Dimensionen ist $\zeta = 9\sqrt{2}$ und es gibt 2 Phasen für

$$K > \frac{1}{4} \log 108 \implies T < \frac{2}{3 \log 108} T_{\text{MF}} \approx 0.1424 T_{\text{MF}}.$$

Die Existenz von mehreren Phasen in höher-dimensionalen Modellen kann auch mit den Korrelationsungleichungen, denen wir uns jetzt zuwenden, bewiesen werden.

10.4 Korrelationsungleichungen

Wir betrachten ein Spinmodell auf einem (zunächst) endlichen Gitter Λ mit $V = |\Lambda|$ Gitterpunkten und dem Konfigurationenraum

$$\Omega = \{w = (s_1, \dots, s_V) \mid s_x \in \mathbb{R}\}. \quad (10.31)$$

Jeder Spin kann zunächst alle reellen Werte annehmen. Die Einschränkung von s_x erfolgt durch ein a priori Wahrscheinlichkeitsmass μ_x für s_x , dass *gerade* sei. Zum Beispiel gehört zum Ising-Spin ein mit Gewichten $\frac{1}{2}$ auf den Punkten ± 1 konzentriertes a priori Mass. Wir untersuchen ferromagnetische Gittersysteme mit Energie

$$H(w) = - \sum_{K \subset \Lambda} J_K s_K, \quad \text{wobei} \quad s_K = \prod_{x \in K} s_x, \quad J_K \geq 0. \quad (10.32)$$

Der kanonische Erwartungswert einer Spinfunktion $A(w)$ ist

$$\langle A \rangle = \frac{1}{Z} \int_{\mathbb{R}^V} A(w) e^{-\beta H(w)} d\mu(w), \quad d\mu(w) = \prod_{x=1}^V d\mu_x(s_x), \quad (10.33)$$

mit der entsprechenden Zustandssumme Z , so dass $\langle 1 \rangle = 1$ gilt.

Weiter betrachten wir das „doppelte“ System auf Λ , das aus 2 unabhängigen Kopien des ursprünglichen Systems besteht:

$$\begin{aligned} \text{Konfigurationen:} & \quad (w, w') \in \mathbb{R}^V \times \mathbb{R}^V \\ \text{a-priori-Mass:} & \quad d\mu(w, w') = d\mu(w) d\mu(w') \\ \text{Energie:} & \quad H(w, w') = H(w) + H(w'). \end{aligned} \quad (10.34)$$

In diesem System benutzt man oft die Variablen

$$u = \frac{1}{\sqrt{2}}(w + w') \quad \text{und} \quad v = \frac{1}{\sqrt{2}}(w - w'). \quad (10.35)$$

Es gilt nun die erste Ungleichung von GRIFFITHS, KELLY und SHERMAN:

1. GKS-Ungleichung: *Ist die Energiefunktion $H : \Omega \rightarrow \mathbb{R}$ ferromagnetisch, so gilt die Ungleichung*

$$\langle s_A \rangle \geq 0 \quad (10.36)$$

für alle $A \subset \Lambda$, wobei Gitterpunkte in A mehrfach vorkommen dürfen.

Beweis: Wir entwickeln den Boltzmannfaktor

$$e^{-H(w)} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \left(\sum_K J_K s_K \right)^n = \sum_{n_1, \dots, n_V} \underbrace{a_{n_1 \dots n_V}}_{\geq 0} s_1^{n_1} \cdots s_V^{n_V}$$

und setzen ein,

$$Z \cdot \langle s_A \rangle = \sum_{n_1, \dots, n_V} a_{n_1 \dots n_V} \int s_1^{m_1} \cdots s_V^{m_V} d\mu(s_1) \cdots d\mu_V(s_V),$$

wobei $m_x = n_x +$ (Vielfachheit von x in A) ist. Da μ_x als gerade vorausgesetzt wurde, ist das letzte Integral

$$\prod_{x=1}^V \int s_x^{m_x} d\mu_x(s_x) = \begin{cases} 0 & \text{für ungerades } m_x \\ \geq 0 & \text{sonst.} \end{cases}$$

Also ist $\langle s_a \rangle$ als Summe von nicht-negativen Termen selbst nicht-negativ.

Als nächstes beweisen wir die

Ginibre-Ungleichung: *Im doppelten System ist*

$$\langle u_A v_B \rangle \geq 0 \tag{10.37}$$

für alle $A, B \subset \Lambda$.

Beweis: Die negative Energie

$$-H(w, w') = \sum_{K \subset \Lambda} J_K \left[\left(\frac{u+v}{\sqrt{2}} \right)_K + \left(\frac{u-v}{\sqrt{2}} \right)_K \right]$$

ist ein Polynom mit positiven Koeffizienten in u und v . Wir erhalten eine ähnliche Entwicklung wie im Beweis der GKS-Ungleichung (10.36). Wir müssen daher noch zeigen, dass

$$I_{mn} = \int_{\mathbb{R}^2} u^m v^n d\mu(s) d\mu(s') \geq 0$$

ist. Dies ist klar für gerade Exponenten m und n . Ist m oder n ungerade, dann verschwindet I_{mn} . Dies folgt aus der Invarianz des Masses $d\mu(s) d\mu(s')$ bezüglich:

$$\begin{aligned} (s, s') &\longrightarrow (-s', -s) \iff (u, v) \longrightarrow (-u, v) \\ (s, s') &\longrightarrow (s', s) \iff (u, v) \longrightarrow (u, -v). \end{aligned}$$

Das Mass ist also gerade in den neuen Variablen u und v und deshalb verschwindet I_{mn} wenn m oder n ungerade ist. Als nächstes beweisen wir die

2. GKS-Ungleichung: Es gilt die Ungleichung

$$\langle s_A s_B \rangle - \langle s_A \rangle \langle s_B \rangle \geq 0 \quad \forall A, B \subset \Lambda. \quad (10.38)$$

Beweis: Im doppelten System ist

$$\begin{aligned} \langle s_A s_B \rangle - \langle s_A \rangle \langle s_B \rangle &= \langle s_A (s_B - s'_B) \rangle \\ &= \left\langle \left(\frac{u+v}{\sqrt{2}} \right)_A \left[\left(\frac{u+v}{\sqrt{2}} \right)_B - \left(\frac{u-v}{\sqrt{2}} \right)_B \right] \right\rangle. \end{aligned}$$

Der Ausdruck in den eckigen Klammern ist wieder ein Polynom in u, v mit positiven Koeffizienten. Mit der Ungleichung (10.37) von GINIBRE folgt dann die Ungleichung (10.38).

Wir betrachten nun anstelle des allgemeinen Modells mit Energie (10.32) den speziellen Fall von *Paarwechselwirkungen*,

$$H(w) = - \sum_{\langle xy \rangle} J_{xy} s_x s_y - \sum_x J_x s_x \quad (10.39)$$

und setzen zunächst ferromagnetische Kopplungen $J_{xy} \geq 0$ voraus. Dann gilt die

Percus-Ungleichung: *Im doppelten System ist*

$$\langle v_A \rangle \geq 0 \quad \text{für alle } A \subset \Lambda. \quad (10.40)$$

Beweis: Die Transformation

$$\begin{pmatrix} s \\ s' \end{pmatrix}_x = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u \\ v \end{pmatrix}_x$$

ist eine Drehung, so dass

$$-H(w) - H(w') = \sum_{xy} J_{\langle xy \rangle} (u_x u_y + v_x v_y) + \sqrt{2} \sum_x J_x u_x.$$

Nun entwickelt man nur den Term $\exp(\sum J_{xy}v_xv_y)$ und zeigt, dass

$$I = \sum_{\mathbb{R}^{2V}} d\mu(w)d\mu(w')v_1^{n_1} \cdots v_V^{n_V} \exp\left(\sum_{\langle xy \rangle} J_{xy}u_xu_y + \sqrt{2} \sum_x J_xu_x\right) \geq 0$$

ist. Da das apriori-Mass gerade in allen u_x und allen v_x ist, ist dieses Integral nur ungleich Null wenn alle Exponenten n_x gerade sind. Für gerade n_x ist das Integral aber offensichtlich ≥ 0 .

Neben den hier vorgestellten und bewiesenen Resultaten gibt es weitere Korrelationsungleichungen, z.B. für das Produkt von 3 oder 4 Spinfunktionen. Ich verweise auf [48].

Anwendungen: Besonders wichtig ist die 2. GKS-Ungleichung in der Form

$$\langle s_A s_B \rangle - \langle s_A \rangle \langle s_B \rangle = \frac{\partial \langle s_A \rangle}{\partial J_B} \geq 0. \quad (10.41)$$

Es folgt die Monotonie der Korrelationfunktionen als Funktionen der Kopplungskonstanten. Insbesondere wächst $\langle s_A \rangle$ monoton

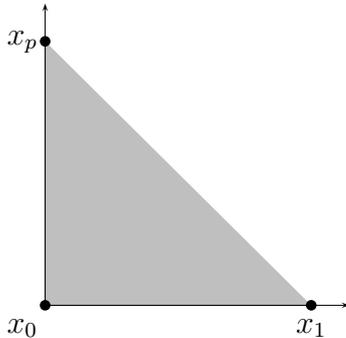
- bei wachsendem äußeren Feld
- bei wachsender ferromagnetischer Kopplung
- bei sinkender Temperatur.

Die Ungleichung (10.41) erlaubt uns, verschiedene Modelle der statistischen Mechanik miteinander zu vergleichen. So folgt zusammen mit dem Peierlschen Argument für Systeme mit NN-Wechselwirkung sofort die Existenz einer spontanen Magnetisierung falls noch *zusätzliche ferromagnetische Wechselwirkungen* längerer Reichweite wirken. Diese ist sogar größer und die entsprechende kritische Temperatur nimmt zu. Ferner ist die spontane Magnetisierung eine sinkende Funktion der Temperatur. Es folgt weiter, dass ein 3-dimensionales Ising-Modell, dass durch ferromagnetische Kopplung von 2-dimensionalen Modellen entsteht, eine größere Magnetisierung und damit eine höhere kritische Temperatur als das 2-dimensionale Modell hat.

10.5 Anhang B: Differenzenkalkül

Bei der Behandlung von allgemeinen Gittertheorien und insbesondere der Dualitäten lohnt es, den Differenzen-Kalkül auf dem Gitter zu kennen. Der Vollständig-

keit halber erinnern wir an die Definition und die wesentlichen Eigenschaften von Simplicial-Komplexen in einem Euklidischen Raum¹.



Gegeben seien affine unabhängige Punkte x_0, x_1, \dots in einem abstrakten Raum. Ein p -Standardsimplex v_p ist die konvexe Hülle

$$\langle x_0 x_1 \dots x_p \rangle = \left\{ x = \sum_{i=0}^p \lambda_i x_i \mid \lambda_i \geq 0, \sum_{i=0}^p \lambda_i = 1 \right\}.$$

Sind alle baryzentrischen Koordinaten λ_i positiv, so liegt x im Innern des Simplex. Ist $\lambda_i = 0$, so liegt x auf der Seite gegenüber dem Vertex x_i .

Ein 0-Simplex $\langle x_0 \rangle$ ist ein Punkt, ein 1-Simplex $\langle x_0 x_1 \rangle$ eine Strecke, ein 2-Simplex $\langle x_0 x_1 x_2 \rangle$ ein Dreieck und ein 3-Simplex $\langle x_0 x_1 x_2 x_3 \rangle$ ein Tetraedron. Ein *orientierter* p -Simplex ändert das Vorzeichen bei einer Orientierungsänderung: Ist π eine Permutation von p Elementen, so ist

$$\langle \pi(x_0) \dots \pi(x_p) \rangle = \text{sign}(\pi) \langle x_0 \dots x_p \rangle. \quad (\text{B.1})$$

Der j -Seite eines Simplex ist die Menge definiert durch $\lambda_j = 0$. Sie ist gleich dem x_j gegenüberliegenden Oberflächenstück. Die Seiten des 1-Simplex $\langle x_0 x_1 \rangle$ sind die beiden Punkte (0-Simplexe) x_0 und x_1 , die 3 Seiten eines 2-Simplex $\langle x_0 x_1 x_2 \rangle$ die drei Strecken (1-Simplexe) $\langle x_0 x_1 \rangle$, $\langle x_1 x_2 \rangle$ und $\langle x_2 x_0 \rangle$ usw.

p -Simplexe sind spezielle p -Zellen, also p -dimensionale konvexe Polyeder v_p im \mathbb{R}^d . Ein Zellkomplex K ist eine Menge von Zellen $\{v_p^1, v_p^2, \dots\}$, so dass

- Jede Seite einer Zelle eine Zelle ist.
- Die Schnittmenge zweier Zellen v_p^i und v_p^j entweder leer oder eine gemeinsame Seite der beiden Zellen ist.

Eine *Simplicial-Komplex* ist ein Zellkomplex, dessen Zellen Simplexe sind. Hier sind insbesondere Zellkomplexe, die zu einem Raumgitter gehören von Interesse. Die Anzahl p -dimensionaler orientierter Zellen des endlichen Gitters (Punkte, Kanten, Plaquetten, Kuben,...) sei N_p . Die geometrischen Objekte eines Zellkomplexes sind formale endliche Summen von p -Zellen,

$$\phi_p = \sum_{i=1}^{N_p} \varphi_i v_p^i, \quad (\text{B.2})$$

¹In dieser Vorlesung benötigen wir nicht die allgemeineren Simplexe in Mannigfaltigkeiten.

und werden p -Ketten genannt. Die Koeffizienten φ_i sind Elemente einer additiv geschriebenen Abelschen Gruppe \mathcal{G} . Sie sind die Stärke des Feldes ϕ_p in der Zelle v_p^i , analog zum Wert eines Skalarfeldes in einem Punkt. Eine alternative Schreibweise für die Ketten eines Simplicialkomplexes ist

$$\begin{aligned}\phi_0 &= \sum_i \varphi_i \langle x_i \rangle \\ \phi_1 &= \frac{1}{2} \sum_{ij} \varphi_{ij} \langle x_i x_j \rangle \\ \phi_2 &= \frac{1}{3!} \sum_{ijk} \varphi_{ijk} \langle x_i x_j x_k \rangle \quad \dots\end{aligned}\tag{B.3}$$

Wegen (B.1) sind die $\varphi_{ij}, \varphi_{ijk}, \dots$ antisymmetrisch in ihren Indizes,

$$\varphi_{\pi(i_1)\dots\pi(i_p)} = \text{sign}(\pi) \varphi_{i_1, \dots, i_p}.$$

Die *Kettengruppe* $C_p(\mathcal{G})$ ist die freie Abelsche Gruppe über p -Zellen. Gehören die Zellen zu einem Gitter Λ , so schreiben wir oft $C_p(\Lambda, \mathcal{G})$ für die Kettengruppe. Der Körper $|K|$ eines Komplexes K ist die Vereinigung aller Zellen. Ist eine Menge der Körper eines Simplicialkomplexes K , dann nennt man K eine *Triangulation* dieser Menge. Die Triangulation einer endlichen Menge S von Punkten im \mathbb{R}^d ist der Simplicialkomplex K mit $|K| = \text{conv. Hülle}(S)$. Jede p -Zelle hat eine Simplicialzerlegung, so dass Simplexe die fundamentalen Bausteine von Zellen sind.

Rand und Co-Rand: Im folgenden werden der *Randoperator* und sein adjungierter Operator, der *Co-Randoperator* eine wichtige Rolle spielen. Der Randoperator ordnet einer Kette von Zellen den orientierten Rand zu,

$$\partial : C_p(\mathcal{G}) \longrightarrow C_{p-1}(\mathcal{G}).\tag{B.4}$$

Für einen orientierte p -Zelle ist

$$\partial v_p^i = \sum_j [v_p^i : v_{p-1}^j] v_{p-1}^j,\tag{B.5}$$

wobei die *Inzidenzmatrix* wie folgt definiert ist:

$$[v_p^i : v_{p-1}^j] = \begin{cases} \pm 1 & \text{falls } v_{p-1}^j \subset v_p^i \\ 0 & \text{sonst.} \end{cases}\tag{B.6}$$

Das Plus- oder Minuszeichen berücksichtigt die relative Orientierung der beiden Zel-

len. Für ein p -Simplex ist der Rand gegeben durch

$$\partial\langle x_0 \dots x_p \rangle = \sum_0^p (-)^j \langle x_0 \dots \check{x}_j \dots x_p \rangle \quad (\text{B.7})$$

Die Definition (B.7) für Simplexe impliziert die Definition (B.6) für allgemeinere Zellen. Um dies einzusehen wähle man eine Simplicialzerlegung der Zelle.

Das Bild von ∂ ist ein orientierter Rand. Ist $\langle x_0 x_1 \rangle$ die orientierte Linie von x_0 zu x_1 , dann ist ihr Rand gleich dem Endpunkt minus dem Anfangspunkt. Ist $\langle x_0 x_1 x_2 \rangle$ ein orientiertes Dreieck, dann ist sein Rand die Summe der orientierten Linien $\langle x_1 x_2 \rangle - \langle x_0 x_2 \rangle + \langle x_0 x_1 \rangle$. Der Randoperator ∂ wird linear auf Ketten ausgedehnt,

$$\partial\phi_p = \sum \phi_i \partial v_p^i.$$

Zum Beispiel ist der Rand der 1- und 2-Ketten eines Simplicialkomplexes

$$\begin{aligned} \partial\phi_1 &= \frac{1}{2} \sum_{ij} \phi_{ij} (\langle x_j \rangle - \langle x_i \rangle) = \sum_{i<j} \phi_{ij} (\langle x_j \rangle - \langle x_i \rangle) \\ \partial\phi_2 &= \frac{1}{3!} \sum_{ijk} \phi_{ijk} (\langle x_j x_k \rangle - \langle x_i x_k \rangle + \langle x_i x_j \rangle) \\ &= \sum_{i<j<k} \phi_{ijk} (\langle x_j x_k \rangle - \langle x_i x_k \rangle + \langle x_i x_j \rangle). \end{aligned}$$

Der Randoperator ist nilpotent,

$$\partial\partial = 0, \quad (\text{B.8})$$

und der Rand eines Randes gleich Null. Es genügt, dies für Simplexe zu beweisen,

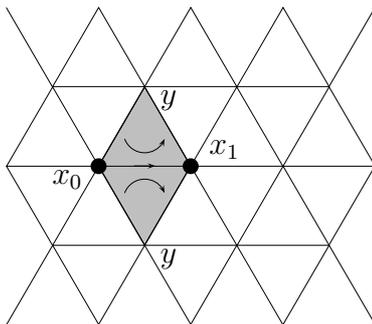
$$\begin{aligned} \partial\partial\langle x_0 x_1 x_2 \dots x_p \rangle &= \partial \left(\sum_j (-)^j \langle x_0 \dots \check{x}_j \dots x_p \rangle \right) \\ &= \sum_{k<j} (-)^{j+k} \langle x_0 \dots \check{x}_k \dots \check{x}_j \dots x_p \rangle \\ &\quad - \sum_{k>j} (-)^{j+k} \langle x_0 \dots \check{x}_j \dots \check{x}_k \dots x_p \rangle = 0. \end{aligned} \quad (\text{B.9})$$

Der *Co-Rand* d ist eine lineare Abbildung von C_p nach C_{p+1} . Wenden wir d auf eine p -Zelle v_p an, so erhalten wir die Summe derjenigen $p+1$ -Zellen, deren Rand $+v_p$

enthält,

$$dv_p^i = \sum_j [v_{p+1}^j : v_p^i] v_{p+1}^j. \tag{B.10}$$

Hier ist wieder das Vorzeichen wichtig.



Zum Beispiel ist der Co-Rand eines Simplex $\langle x_0 \dots x_p \rangle$ die Kette

$$\sum_{y: \langle yx_0 \dots x_p \rangle} \langle yx_0 x_1 \dots x_p \rangle. \tag{B.11}$$

Summiert wird hier über alle y , für die $\langle yx_0 \dots x_p \rangle$ ein $p + 1$ -Simplex ist. Beim Dreiecksgitter ist $d\langle x_0 x_1 \rangle$ die Summe von zwei Dreiecken.

Genauso wie der Randoperator ist der *Co-Randoperator* nilpotent,

$$dd = 0. \tag{B.12}$$

Für Standardsimplexe ist der Beweis relativ einfach:

$$dd\langle x_0 x_1 \dots x_p \rangle = \sum_{y, y': \langle y' y x_0 \dots x_p \rangle} \langle y' y x_0 \dots x_p \rangle = 0,$$

da sich $\langle yy' \dots \rangle$ und $\langle y'y \dots \rangle = -\langle yy' \dots \rangle$ in der Summe wegheben. Später werden wir sehen, dass d der zu ∂ adjungierte Operator ist. Aus $\partial\partial = 0$ folgt dann sofort $dd = 0$ für beliebige Ketten.

Wir notieren die expliziten Formeln für 0 und 1-Ketten von Simplicialkomplexen. Eine 0-Kette (Skalarfeld) $\phi_0 = \sum \phi_x \langle x \rangle$ hat den Co-Rand

$$d\phi_0 = \sum_x \phi_x \sum_{y: \langle yx \rangle} \langle yx \rangle = \sum_{\langle xy \rangle} (\phi_x - \phi_y) \langle yx \rangle. \tag{B.13}$$

Er ist der *Differenziengradient* von ϕ_0 . Für eine 1-Kette (Vektorfeld) ϕ_1 ist

$$d\phi_1 = \sum_{\langle xy \rangle} \phi_{xy} \sum_{z: \langle zxy \rangle} \langle zxy \rangle = \sum_{\langle xyz \rangle} (\phi_{xy} - \phi_{zy} + \phi_{zx}) \langle zxy \rangle \tag{B.14}$$

Die *Divergenz* einer 1-Kette erhält man mit dem Randoperator. Man findet

$$\partial\phi_1 = \sum_{\langle yx \rangle} \phi_{yx} \partial\langle yx \rangle = \sum_{\langle yx \rangle} \phi_{yx} (\langle x \rangle - \langle y \rangle) = \sum_x \langle x \rangle \sum_{y:\langle yx \rangle} \phi_{xy}. \quad (\text{B.15})$$

Der Koeffizient von $\langle x \rangle$ ist minus der Differenzen-Divergenz am Punkt x . Wir erwarten, dass ∂d proportional zum Laplace-Operator sein sollte. Für eine 0-Zelle gilt zum Beispiel,

$$\begin{aligned} \partial d\phi_0 &= \delta \left(\sum_x \sum_{y:\langle yx \rangle} \phi_x \langle yx \rangle \right) \\ &= \sum_x \langle x \rangle \left(q\phi_x - \sum_{y:\langle yx \rangle} \phi_y \right) = - \sum_x (\Delta\phi_0)(x) \langle x \rangle, \end{aligned} \quad (\text{B.16})$$

wobei q die Anzahl 1-Simplexe ist, die x als Randpunkt haben. Für einen Zellkomplex ist

$$\partial d\phi_0 = \sum_{jk} \phi_i [v_1^j : v_0^i] [v_1^j : v_0^k] v_0^k. \quad (\text{B.17})$$

Für 0-Ketten aus $C_0(\Lambda, \mathcal{G})$ findet man wieder die Formel (B.16), wobei q die Anzahl nächster Nachbarn von x ist und über alle nächsten Nachbarn y von x summiert wird. Für das 2-dimensionale Wabengitter ist $q = 3$, das quadratische Gitter $q = 4$ und das Dreiecksgitter $q = 6$.

Satz von Stokes: Wir geben hier das diskrete Gegenstück zum Stokesschen Satzes im Kontinuum an. Dazu betrachten wir einen orientierten Weg \mathcal{C} auf dem Gitter Λ , der zwei Punkte $a, b \in \Lambda$ verbindet,

$$\mathcal{C} = \langle x_0x_1 \rangle + \langle x_1x_2 \rangle + \dots + \langle x_{n-1}x_n \rangle, \quad \langle x_i x_{i+1} \rangle \in K, \quad (\text{B.18})$$

wobei $x_0 = a$ und $x_n = b$ sein soll. Offensichtlich ist $\partial\mathcal{C} = \langle b \rangle - \langle a \rangle$. Wir wollen annehmen, dass der Weg sich nicht selbst schneidet. Dem Wegintegral in der Kontinuums-theorie entspricht folgende Formel für eine 1-Kette,

$$(\phi, \mathcal{C}) \equiv \phi(\mathcal{C}) = \sum_{\langle xy \rangle \in \mathcal{C}} \phi_{xy}, \quad (\text{B.19})$$

wobei wir auf der linken Seite das in beiden Argumenten innere Produkt

$$(v_p^i, v_q^j) = \delta^{ij} \delta_{pq} \quad (\text{B.20})$$

eingeführt. Für zwei orientiert Simplexe, die als Mengen gleich sind aber eine andere Orientierung haben, ist das innere Produkt -1 . Für zwei Kanten gilt zum Beispiel

$$(\langle xy \rangle, \langle uv \rangle) = \delta(x, u)\delta(y, v) - \delta(x, v)\delta(y, u). \quad (\text{B.21})$$

Nun betrachten wir $(d\phi, \mathcal{C})$ für ein beliebiges Skalarfeld (1-Kette),

$$(d\phi, \mathcal{C}) = \sum_{i=0}^{n-1} (\phi_{x_{i+1}} - \phi_{x_i}) = \phi_b - \phi_a \quad (\text{B.22})$$

wobei wir $x_0 = a$ und $x_n = b$ berücksichtigten. Sind a und b nächste Nachbarn auf einem Gitter Λ , dann ist

$$(d\phi, \langle ab \rangle) = \phi_b - \phi_a$$

genau die Form der Wechselwirkung für ein Ising-artiges Spinmodell.

Da andererseits $\partial\mathcal{C} = \langle b \rangle - \langle a \rangle$ gilt, folgt unmittelbar der Stokesscher Satz

$$(d\phi, \mathcal{C}) = (\phi, \partial\mathcal{C}). \quad (\text{B.23})$$

Es sein nun \mathcal{S} eine orientierte Fläche im Gitter. Damit meinen wir eine Kette aus orientierten 2-Zellen mit gemeinsamen Seiten und derart orientiert, dass sich die inneren Ränder wegheben,

$$\mathcal{S} = \sum_{i \in I} v_2^i, \quad \partial\mathcal{S} = \sum_{i \in I, k} [v_2^i : v_1^k] v_1^k. \quad (\text{B.24})$$

Die Fläche \mathcal{S} braucht keineswegs eben zu sein. Es sei nun

$$\phi = \sum_j \phi_j v_1^j, \quad d\phi = \sum_{jk} \phi_j [v_2^k : v_1^j] v_2^k.$$

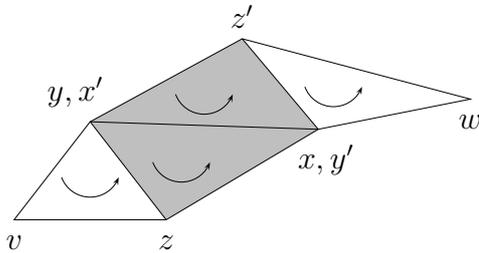
eine beliebige 1-Kette. Dann sind

$$\begin{aligned} (d\phi, \mathcal{S}) &= \sum_{i \in I} \sum_{j, k} \phi_j ([v_2^k : v_1^j] v_2^k, v_2^i) = \sum_{i \in I, j} \phi_j [v_2^i : v_1^j] \\ (\phi, \partial\mathcal{S}) &= \sum_j \sum_{i \in I, k} \phi_j (v_1^j, [v_2^i : v_1^k] v_1^k) = \sum_{i \in I, j} \phi_j [v_2^i : v_1^j] \end{aligned}$$

offensichtlich gleich und es folgt der Stokessche Satz

$$(d\phi, \mathcal{S}) = (\phi, \partial\mathcal{S}). \quad (\text{B.25})$$

In der folgenden Abbildung ist der Satz für ein Simplicialkomplex illustriert.



Im Beitrag der beiden schraffierten Dreiecke zu $(d\phi, S)$ heben sich ϕ_{xy} und $\phi_{x'y'}$ gegenseitig weg. Ganz analog heben sich für alle inneren Kanten $\langle xy \rangle$ die Beiträge ϕ_{xy} weg. Es bleiben nur ϕ_{xy} für Kanten $\langle xy \rangle$ auf dem Rand ∂S übrig.

Ist $S = P$ eine Plaquette auf einem kubischen Gitter, dann ist

$$(d\phi, P) = (\phi, \partial P) = \sum_{\langle xy \rangle \in \partial P} \phi_{xy}$$

der Wilsonsche Term in Gittereichtheorien. Addieren wir zu ϕ den Co-Rand eines Feldes χ , so ändert sich der Term nicht,

$$(d\phi', P) = (d(\phi + d\chi), P) = (d\phi, P).$$

Der Satz von Stokes ist ein Spezialfall eines allgemeineren Satzes für eine p -Kette ϕ_p und ein $p - 1$ -Kette χ_{p-1} . Für den Beweis notieren wir, dass

$$(dv_p^i, v_{p+1}^j) = (v_p^i, \partial v_{p+1}^j) \tag{B.26}$$

gilt. In der Tat, mit Hilfe von (B.10) und (B.18) findet man für die linke Seite

$$\left(\sum_k [v_{p+1}^k : v_p^i] v_{p+1}^k, v_{p+1}^j \right) = [v_{p+1}^j : v_p^i],$$

und mit (B.5) für die rechte Seite

$$\left(v_p^i, \sum_k [v_{p+1}^j : v_p^k] v_p^k \right) = [v_{p+1}^j : v_p^i].$$

Also ist d der zu ∂ adjungierte Operator auf den Zellen. Wegen der Bilinearität des inneren Produktes gilt dann für beliebige Ketten ϕ_p und χ_{p-1} die Formel

$$(d\phi_p, \chi_{p+1}) = (\phi_p, \partial\chi_{p+1}). \tag{B.27}$$

Wählt man hier für χ_{p+1} ein Weg oder eine Fläche auf dem Gitter, so erhält man die entsprechenden Sätze von Stokes.

Dualität: Die 0-Zellen des zu K dualen Komplexes K^* sind die d -Zellen des Komplexes $K \subset \mathbb{R}^d$. Zwei Knoten ${}^*v_0^i, {}^*v_0^j$ sind genau dann Randpunkte derselben 1-Zelle, wenn die entsprechenden d -Zellen v_d^i und v_d^j eine gemeinsame Seite haben. Es sei V ein Volumen des Gitters Λ , also eine d -Kette aus orientierten d -Zellen mit gemeinsamen Seiten und derart orientiert, dass sich die inneren Seiten wegheben. Unter der Dualitätstransformation geht dieses d -dimensionale Volumen $V \subset E^n$ über in die duale 0-Kette

$$V = \sum_{i \in V} v_d^i \longrightarrow V^* = \sum_{i \in V} {}^*v_0^i. \tag{B.28}$$

Mit $i \in V$ meinen wir, dass die d -dimensionale Zelle v_d^i in V liegt. Der Co-Rand des dualen Volumens ist

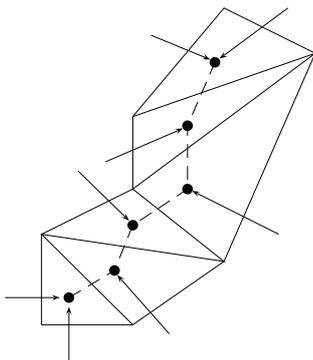
$$dV^* = \sum_j \sum_{i \in V} [{}^*v_1^j : {}^*v_0^i] {}^*v_1^j,$$

und deshalb gilt für eine 1-Kette auf dem dualen Gitter, $\phi_1^* = \sum_i \phi_i^* v_1^i$, folgende Identität

$$({}^*\phi_1, dV^*) = \sum_j \sum_{i \in V} \phi_i [{}^*v_1^j : {}^*v_0^i].$$

Sind beide Endpunkte von ${}^*v_1^j$ im Volumen V , dann heben sich die entsprechenden Terme in der Summe weg und wir erhalten die Summe der Amplituden ϕ_i derjenigen Kanten, die den Rand des Volumen V durchstoßen.

Zum Beispiel ist für einen Simplicialkomplex



$$({}^*\phi_1, dV^*) = \sum_{\langle ij \rangle \in V^c \times V} \phi_{ij}.$$

In der nebenstehenden Figur ist die Situation für einen 2-dimensionalen Simplicialkomplex gezeigt. Ein Index von ϕ_{ij} gehört zu einem Knoten außerhalb V und der andere zu einem innerhalb V .

Nun ist es einfach zu beweisen, dass

$$({}^*\phi_1, dV^*) = (\partial \phi_1^*, V^*) \tag{B.29}$$

gilt. Dies ist das duale Divergenztheorem. Allgemeiner macht man beim Übergang von einem Gitter $\Lambda \subset \mathbb{R}^d$ zum dualen Gitter die folgenden Identifikation für die Erzeugenden der Kettengruppen $C(\Lambda, \mathcal{G})$ und $C^*(\Lambda^*, \mathcal{G})$:

$$\begin{aligned} v_p^i &\longleftrightarrow {}^*v_{d-p}^i \\ [v_p^i : v_{p-1}^j] &\longleftrightarrow [{}^*v_{d-p+1}^j : {}^*v_{d-p}^i]. \end{aligned} \quad (\text{B.30})$$

Wir wollen hier annehmen, dass das ursprüngliche Gitter eine Triangulation einer geschlossenen und orientierbaren Mannigfaltigkeit, zum Beispiel des d -dimensionalen Torus, sei. Dann sind die v_p^* ebenfalls Zellen eines *Gitters*.

Jeder p -Kette wird also eine duale $d - p$ -Kette zugeordnet,

$$\phi_p = \sum_i \phi_i v_p^i \longrightarrow {}^*\phi_p = \sum_i \phi_i^* v_{d-p}^i. \quad (\text{B.31})$$

Mit dem entsprechenden inneren Produkt für die dualen Ketten,

$$({}^*v_p^i, {}^*v_q^j) = \delta^{ij} \delta_{pq} \quad (\text{B.32})$$

ist die Dualitätstransformation „längenerhaltend“,

$$(\phi_p, \chi_q) = ({}^*\phi_{d-p}, {}^*\chi_{d-q}), \quad (\text{B.33})$$

Daraus folgen sofort die wichtige Formeln

$${}^*d^* = \partial \quad \text{und} \quad {}^*\partial^* = d. \quad (\text{B.34})$$

Der Randoperator geht in den Co-Randoperator über und umgekehrt,

$$\begin{aligned} \partial \phi_p &= \sum_{ij} \phi_i [v_p^i : v_{p-1}^j] v_{p-1}^j \xleftarrow{*} \sum_{ij} \phi_i [{}^*v_{d-p+1}^j : {}^*v_{d-p}^i] {}^*v_{d-p+1}^j = d^* \phi_{d-p} \\ d \phi_p &= \sum_{ij} \phi_{ij} [v_{p+1}^j : v_p^i] v_{p+1}^j \xleftarrow{*} \sum_{ij} \phi_i [{}^*v_{d-p}^i : {}^*v_{d-p-1}^j] {}^*v_{d-p-1}^j = \partial^* \phi_{d-p}. \end{aligned}$$

und (B.27) geht über in

$$(\partial^* \phi_p, {}^*\chi_{p-1}) = ({}^*\phi_p, d^* \chi_{p-1}) \quad (\text{B.35})$$

Das Divergenztheorem (B.2) ist ein Spezialfall dieser allgemeineren Formel.

Hodge-Komplex: Oft hat man im unterliegenden Euklidischen Raum p -Formen, die über Simplexe, Zellen oder Ketten integriert werden können. Wir wollen hier kurz

an die wichtigsten Eigenschaften von p -Formen und insbesondere an die Integralsätze erinnern. Es sei M eine differenzierbare Mannigfaltigkeit und $f : \mathbb{R}^d \rightarrow M$ differenzierbar. In lokalen Koordinaten sei $x^i = f(t^1, \dots, t^d)$. Im Allgemeinen wird f allerdings kein Diffeomorphismus sein. Das Bild $\sigma_p = f(v_p) \subset M$ der Zelle $v_p \subset \mathbb{R}^d$ ist dann eine *Zelle* in M . Es ist am einfachsten mit einem simplizialen Komplex zu arbeiten. Dann sind die σ_p *Simplexe* in M . Wir wollen immer voraussetzen, dass $f(v_p)$ in einer Karte von M liegt.

Es sei ω eine differenzierbare p -Form in M . In lokalen Koordinaten hat sie die Form

$$\omega = \frac{1}{p!} \sum_{i_1, \dots, i_p=1}^d \omega_{i_1 \dots i_p}(x) dx^{i_1} \wedge \dots \wedge dx^{i_p}.$$

Diese Form kann über einen p -Simplex σ_p integriert werden,

$$\int_{\sigma_p} \omega = \frac{1}{p!} \int_{v_p} \omega_{i_1 \dots i_p} \frac{\partial(x^{i_1} \dots x^{i_p})}{\partial(t^1 \dots t^p)} dt^1 \dots dt^p = \int_{v_p} f^*(\omega). \quad (\text{B.36})$$

Diese Definition ist natürlich unabhängig von der gewählten Karte in M . Für ein p -Form ω ist das Integral über die p Kette $c_p = f(\phi_p) = \sum \phi_i \sigma_p^i$ durch

$$\int_{c_p} \omega = \sum \phi_i \int_{\sigma_p^i} \omega \quad (\text{B.37})$$

definiert. Es gilt zudem der wichtige

Satz [Stokes] *Es sei ω^{p-1} eine $p-1$ -Form und c_p eine p -Kette in M . Dann gilt*

$$\int_{c_p} d\omega^{p-1} = \int_{\partial c_p} \omega^{p-1}. \quad (\text{B.38})$$

Wir betrachten die einfachsten Beispiele für welche $M = \mathbb{R}^d$ und $f = \mathbb{1}$ ist:

Es sei $\omega^0(x)$ eine 0-Form, also eine differenzierbare Funktion, und $v_1 = \langle x_0 x_1 \rangle$ ein 1-Simplex. Dann gilt

$$\int_{\sigma_1} d\omega^0 = \int_{\partial \sigma_1} \omega^0 = \omega^0(x_1) - \omega^0(x_0)$$

Für eine 1-Form $\omega^1 = \sum \omega_i dx^i$ und einen 2-Simplex $\sigma_2 = \langle x_0 x_1 x_2 \rangle$ gilt entsprechend

$$\int_{\sigma_2} d\omega^1 \stackrel{(\text{B.9})}{=} \int_{\langle x_1 x_2 \rangle} \omega^1 - \int_{\langle x_0 x_2 \rangle} \omega^1 + \int_{\langle x_0 x_1 \rangle} \omega^1.$$

Dies ist aber gerade der bekannte Integralsatz von Stokes in der Formensprache.

Ist nun ω^p eine geschlossene p -Form, $d\omega^p = 0$, dann folgt unmittelbar

$$\int_{\partial c_{p+1}} \omega^p = \int_{c_{p+1}} d\omega^p = 0. \quad (\text{B.39})$$

Die Menge aller *geschlossenen* p -Formen bezeichnen wir mit \dot{F}^p . Unterscheiden sich zwei Ketten nur um einen Rand, $c_p - c'_p = \partial c_{p+1}$, dann gilt für jede geschlossene p -Form

$$\int_{c_p} \omega^p = \int_{c'_p} \omega^p, \quad \omega^p \in \dot{F}^p(M), \quad c_p - c'_p \in \partial C_{p+1}. \quad (\text{B.40})$$

Eine Kette c_p heisst *Zyklus*, wenn sie keinen Rand hat, $\partial c_p = 0$. Die Menge aller p -Zyklen bezeichnen wir mit $\dot{C}_p(M)$. Jeder Rand ist ein Zyklus, $\partial C_{p+1}(M) \subset \dot{C}_p(M)$. Ist nun ω^p exakt, $\omega^p = d\alpha^{p-1}$, dann gilt für jeden Zyklus

$$\int_{c_p} \omega^p = \int_{c_p} d\alpha^{p-1} = \int_{\partial c_p} \alpha^{p-1} = 0. \quad (\text{B.41})$$

Die exakten p -Formen bezeichnen wir mit dF^{p-1} . Unterscheiden sich zwei p -Formen um eine exakte Form, $\omega^p - \omega'^p = d\alpha^{p-1}$, dann gilt für jeden Zyklus

$$\int_{c_p} \omega^p = \int_{c_p} \omega'^p, \quad c_p \in \dot{C}_p, \quad \omega^p - \omega'^p \in dF^{p-1}. \quad (\text{B.42})$$

Zusammengefasst können wir folgendes sagen: ist ω^p eine geschlossene p -Form und c_p ein Zyklus, dann gilt

$$\int_{c_p} \omega^p = \int_{c_p + \partial c_{p+1}} (\omega^p + d\omega^{p-1}). \quad (\text{B.43})$$

Identifiziert man zwei Zyklen, wenn sie sich um einen Rand unterscheiden und zwei geschlossene Formen, wenn sie sich um eine exakte Form unterscheiden, dann gelangt man zu der *Homologiegruppen* und den de Rham'schen Gruppen,

$$\begin{aligned} H_p(M) &= \dot{C}_p(M) / \partial C_{p+1}(M) \\ R^p(M) &= \dot{F}^p(M) / dF^{p-1}(M). \end{aligned} \quad (\text{B.44})$$

Das Integral $\int_{c_p} \omega^p$ hängt nur von den Klassen von ω^p in \dot{F}^p und von c_p in \dot{C}_p ab und

wir erhalten den Komplex

$$\begin{array}{ccccccccccc} C_d & \xrightarrow{\partial} & C_{d-1} & \xrightarrow{\partial} & \dots & \xrightarrow{\partial} & C_2 & \xrightarrow{\partial} & C_1 & \xrightarrow{\partial} & C_0 & \xrightarrow{\partial} & 0 \\ F^0 & \xrightarrow{d} & F^1 & \xrightarrow{d} & \dots & \xrightarrow{d} & F^{d-2} & \xrightarrow{d} & F^{d-1} & \xrightarrow{d} & F^d & \xrightarrow{d} & 0. \end{array} \quad (\text{B.45})$$

Dies sind *exakte Sequenzen* wenn das Bild von ∂ (d) genau dem Kern von ∂ (d) ist. Ist die erste Sequenz in (B.45) exakt, so sind alle Homologiegruppen trivial, ist die zweite Sequenz exakt, dann sind alle de Rham'schen Gruppen trivial.

Kapitel 11

Renormierungsgruppe

Die Monte-Carlo-Simulationen zeigen charakteristische Konfigurationen mit unterschiedlichem Verhalten in den Hoch- und Tieftemperaturphasen und am kritischen Punkt. Man sieht Domänen, deren mittlerer Durchmesser gleich der Korrelationslänge ξ ist.

Für $T > T_c$ findet man typisch *Domänen* gleicher Ausrichtung der Spins mit endlichem Durchmesser, bei T_c mit beliebig großer und kleiner Ausdehnung und für $T < T_c$ mit makroskopischer Ausdehnung und wenigen, endlichen Inseln entgegengesetzter Ausrichtung. Da am kritischen Punkt Domänen beliebiger Größe existieren, sieht jedes Bild auf beliebigen Längenskalen ähnlich aus. Führen wir für typische Konfigurationen eine Skalenänderung durch, im einfachsten Fall durch extremes Dezimieren der Spins, so erhalten wir für $T > T_c$ Bilder mit kleineren Domänen, ähnlich wie wenn wir die Temperatur erhöhen. Betrachten wir dagegen eine typische Konfiguration bei $T < T_c$, so führt die Dezimierung auf ein Bild mit makroskopischen Domänen mit nur noch halb so großen Inseln entgegengesetzter Ausrichtung, ähnlich wie bei Erniedrigung der Temperatur.

In jedem Fall führt eine Skalenänderung mit linearem Dezimierungsfaktor $b > 1$ weg vom kritischen Punkt, außer man startet exakt bei T_c . Die gemachten Beobachtungen legen folgende Frage nahe: Kann eine Skalenänderung exakt äquivalent zu einer Änderung der Temperatur und weiterer Kopplungskonstanten sein. Mit äquivalent meinen wir, dass Zustandssumme und Korrelationsfunktionen (soweit sie für die mikroskopischen und die dezimierten Spins gleichzeitig definiert werden können) übereinstimmen. Wir besprechen zuerst ein einfaches Beispiel für welches dies möglich ist.

Im Jahre 1982 erhielt K.G. WILSON den Nobelpreis für Physik als Würdigung seiner Forschungsarbeit auf dem Gebiet der Renormierungsgruppe. Dieser nichtstörungstheoretische Zugang zur Theorie der kritischen Phänomene entwickelte sich

seither zu einem mächtigen Werkzeug in der Statistischen Physik und Quantenfeldtheorie. Wesentliche Beiträge stammen von STUECKELBERG, PETERMAN, GELL-MAN, LOW und BREZIN in der Quantenfeldtheorie und Teilchenphysik [50] sowie KADANOV, FISHER [49] und WILSON [51] in der Statistischen Physik und Quantenfeldtheorie. Ich verweise auf die Darstellungen in den empfehlenswerten Büchern [52] für eine eingehende Darstellung der Methode.

11.1 Ising-Modelle

Für die Isingkette kann die Dezimierung des System exakt durchgeführt werden. Das verdünnte System ist gleich dem ursprünglichen System mit veränderten Kopplungskonstanten. In $d \geq 2$ Dimensionen werden dagegen bei jeder Verdünnung neue Kopplungen erzeugt und die iterierte Verdünnung kann nicht mehr analytisch berechnet werden.

11.1.1 Ising-Kette

Wir betrachten zuerst die Zustandssumme für N Spins und periodische Randbedingungen. Die Energie ist proportional zu

$$-\beta H = K \sum_{\langle xy \rangle} s_x s_y + h \sum_x s_x \quad \text{mit} \quad K = \beta J, \quad h = \beta \tilde{h}.$$

Man beachte, dass h in dieser Formel das mit der inversen Temperatur multiplizierte und damit dimensionslose „Magnetfeld“ ist. Wir wollen annehmen, dass N gerade ist. Im Ausdruck für die Zustandssumme summieren wir über jeden zweiten Spin ($b = 2$), d.h. über die Spins auf den geraden Gitterpunkten, und erhalten

$$\begin{aligned} Z(N, K, h) &= \sum_{s_1, s_2, \dots} e^{K s_1 s_2 + \frac{1}{2} h (s_1 + s_2)} e^{K s_2 s_3 + \frac{1}{2} h (s_2 + s_3)} \times \dots \\ &= \sum_{s_1, s_2, \dots} e^{K (s_1 s_2 + s_2 s_3) + \frac{1}{2} h (s_1 + 2s_2 + s_3)} \times \dots \\ &= \sum_{s_1, s_3, \dots} \left(e^{(K + \frac{1}{2} h)(s_1 + s_3) + h} + e^{-(K - \frac{1}{2} h)(s_1 + s_3) - h} \right) \dots \end{aligned} \quad (11.1)$$

Nach der Summation über jeden zweiten Spin erhalten wir ein Ising-artiges System auf den ungeraden Gitterpunkten. Die interessante Beobachtung ist, dass man neue

Kopplungskonstanten K' , h' und eine Funktion $g(K, h)$ einführen kann, so dass gilt

$$e^{(K+\frac{1}{2}h)(s_1+s_3)+h} + e^{-(K-\frac{1}{2}h)(s_1+s_3)-h} = e^{2g(K,h)} e^{K's_1s_3+\frac{1}{2}h'(s_1+s_3)}. \quad (11.2)$$

Wir werden die neuen Kopplungen und g weiter unten berechnen. Diese Ersetzung machen wir nun für jeden Faktor in (11.1). Es ergibt sich wieder die Zustandssumme einer Isingkette auf dem ausgedünnten Gitter mit Kopplungen K' , h' ,

$$\begin{aligned} Z(N, K, h) &= e^{Ng} \sum_{s_1, s_3, \dots} e^{K's_1s_3+\frac{1}{2}h'(s_1+s_3)} e^{K's_3s_5+\frac{1}{2}h'(s_3+s_5)} \times \dots \\ &= e^{Ng} Z\left(\frac{N}{2}, K', h'\right). \end{aligned} \quad (11.3)$$

Wir fassen dieses bemerkenswerte Resultat zusammen: auf dem verdünnten Gitter mit doppeltem Gitterabstand finden wir die gleiche funktionale Form für die Energie,

$$\beta H \longrightarrow \beta H' - g(K, h)N, \quad -\beta H' = K' \sum_{\langle x'y' \rangle} s_{x'}s_{y'} + h' \sum_{x'} s_{x'}, \quad (11.4)$$

wobei x' und y' ungerade Gitterpunkte sind. Die soeben vorgenommene „Ausintegration“ von Freiheitsgraden nennt man *Dezimierungsprozedur*. Weiter unten werden wir noch andere Dezimierungsprozeduren besprechen bei denen die Freiheitsgrade nach der Dezimierung nicht mehr eine Teilmenge der ursprünglichen Freiheitsgrade ist.

Um die neuen Konstanten zu berechnen, werten wir die Gleichung (11.2) für drei Werte der beiden Spins (s_1, s_3) aus. Man findet folgende drei unabhängigen Gleichungen:

$$\begin{aligned} (s_1, s_3) = (1, 1) : & \quad 2e^h \cosh(2K + h) = e^{2g} e^{K'+h'} \\ (s_1, s_3) = (-1, -1) : & \quad 2e^{-h} \cosh(2K - h) = e^{2g} e^{K'-h'} \\ (s_1, s_3) = (1, -1) : & \quad 2 \cosh(h) = e^{2g} e^{-K'}. \end{aligned}$$

Aufgelöst nach den drei Funktionen $K'(K, h)$, $h'(K, h)$ und $g(K, h)$ ergibt sich

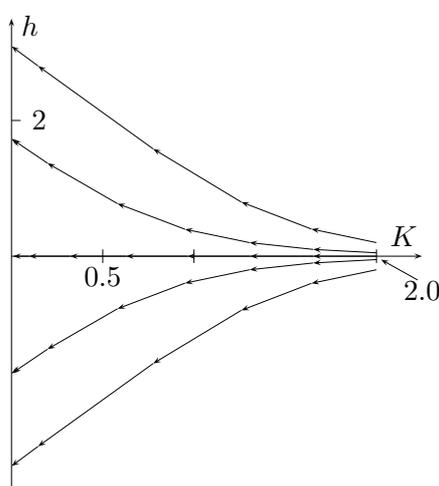
$$\begin{aligned} K \xrightarrow{R_2} K' &= \frac{1}{4} \log \frac{\cosh(2K + h) \cosh(2K - h)}{\cosh^2 h} \\ h \xrightarrow{R_2} h' &= h + \frac{1}{2} \log \frac{\cosh(2K + h)}{\cosh(2K - h)} \\ g(K, h) &= \frac{1}{8} \log (16 \cosh(2K + h) \cosh(2K - h) \cosh^2 h). \end{aligned} \quad (11.5)$$

Die folgenden Abbildung zeigt Trajektorien der Kopplungskonstanten in der (K, h) -

Ebene bei mehrfacher Anwendung der Transformation (11.5). Als Startpunkte für die Iterationen wurden $K = 2$ und $h \in \{\pm 2/10, \pm 5/100, 0\}$ gewählt. Rechts neben der Abbildung findet sich ein kurzes C-Programm zur Berechnung von Trajektorien. Es wird nach den Startwerten für K und H gefragt. Die Ausgabe in den File `renorm1d` ist in `ps-tricks`-Format und kann in Latex eingebunden werden. Die Folge von Punkten

$$(K, h) \xrightarrow{R_2} (K', h') \xrightarrow{R_2} (K'', h'') \xrightarrow{R_2} (K''', h''') \xrightarrow{R_2} \dots$$

in der 2-dimensionalen Ebene der Kopplungskonstanten K und h hat die Achse $K = 0$ als *Attraktor*. Bei jeder Dezimierung oder Ausdünnung des System wird die Kopplung K zwischen nächsten Nachbarn schwächer, $K' \leq K$.



```
#include <stdio.h>
#include <math.h>
int main(void)
{ int i; float k, h, x, y, z; FILE *fp;
  puts("Start-K"); scanf("%f", &k);
  puts("Start-h"); scanf("%f", &h);
  fp=fopen("./renorm1d", "w");
  fprintf(fp, "\\psline(%.3f,%.3f)", 2*k, h);
  for (i=1; i<21; i++){
    x=cosh(2*k+h); y=cosh(2*k-h);
    z=cosh(h); k=log(x*y/(z*z))/4.0;
    h=h+log(x/y)/2.0;
    fprintf(fp, "(%.3f,%.3f)\\n", 2*k, h);
    if (i<20)
      fprintf(fp, "\\psline(%.3f,%.3f)", 2*k, h);
  };
  fclose(fp); return 0;
}
```

Für ein System mit Magnetfeld Null hat das ausgedünnte System ebenfalls Magnetfeld Null. Die Abbildung R_2 kann kein \mathbb{Z}_2 -brechendes Magnetfeld erzeugen und deshalb ist die Gerade $h = 0$ eine Trajektorie der Renormierungsgruppe. Dies folgt unmittelbar aus der Tatsache, dass das ursprüngliche System für $h = 0$ eine \mathbb{Z}_2 Symmetrie aufweist und diese Symmetrie an das ausgedünnte System weitergegeben wird.

Die Hamiltonfunktion der Isingkette wird bei der Dezimierung reproduziert, allerdings mit renormierten Kopplungen (K', h') und doppeltem Abstand zwischen nächsten Nachbarn. Verdünnen wir das System nochmals,

$$R_2 \circ R_2 = R_4, \quad (11.6)$$

dann entspricht der Abstand zwischen nächsten Nachbarn des verdünnten Systems dem Vierfachen des Abstands im ursprünglichen System. Die Kopplungskonstanten (K', h') gehen über in die Konstanten (K'', h'') . Diese Verdünnungsprozedur kann mehrfach ausgeführt werden. Ist b der Skalenfaktor, mit dem das System ausgedünnt

struktion auf dem feineren oder gröberen Gitter gleich,

$$\begin{aligned} & \frac{1}{Z(N, K)} \sum_{\Omega} s_{x'} s_{y'} \exp \left(K \sum_{\langle uv \rangle} s_u s_v \right) \\ &= \frac{1}{Z(\frac{1}{2}N, K')} \sum_{\Omega'} s_{x'} s_{y'} \exp \left(K' \sum_{\langle u'v' \rangle} s_{u'} s_{v'} \right) \end{aligned}$$

Hier liegen die gestrichelten Punkte auf dem groben Gitter. Haben x' und y' auf dem feinen Gitter den Abstand $2n$, dann haben sie auf dem groben Gitter den Abstand n . Für Abstände groß verglichen mit der Korrelationslänge ξ gilt

$$\langle s_x s_y \rangle \sim e^{-|x-y|/\xi}, \quad |x-y| \gg \xi, \quad (11.11)$$

und wir schliessen, dass bei jeder Transformation R_2 die Korrelationslänge halbiert wird,

$$\xi' = \frac{\xi}{2}. \quad (11.12)$$

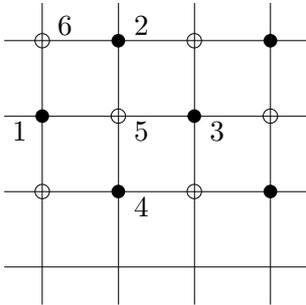
Bei der Lösung des $1d$ Ising-Modells haben wir gezeigt, dass die Korrelationslänge am Tieftemperatur-Fixpunkt divergiert und am Hochtemperatur-Fixpunkt verschwindet. Der Tieftemperatur-Fixpunkt ist ein kritischer Punkt des Systems und am Hochtemperatur-Fixpunkt verschwindet die Wechselwirkung. Die Trajektorien der Renormierungsgruppe enden im trivialen Fixpunktes mit $\xi = 0$. Die Kopplungskonstante K und die Korrelationslänge ξ werden bei jedem Renormierungsschritt verringert.

11.1.2 Das zweidimensionale Modell

Wir betrachten als weiteres, weniger einfaches Beispiel das zweidimensionale feldfreie Ising-Modell mit

$$\beta H = -K \sum_{\langle xy \rangle} s_x s_y. \quad (11.13)$$

Hier sind die Nachbarschaftsverhältnisse etwas komplizierter als in einer Dimension. Die Energiefunktion des ausgedünnten Systems enthält neben der nächsten-Nachbarn Wechselwirkung auch Kopplungen zwischen übernächsten Nachbarn. In der Zustandssumme betrachten wir nun den Beitrag aller Spins auf den offenen Gitterpunkten der folgenden Abbildung. Wir erhalten dann ein effektives Spinmodell für die Spins auf den vollen Gitterpunkten.



Zum Beispiel erhalten wir vom Beitrag des Spins auf dem Punkt 5

$$\sum_{s_5=\pm 1} e^{K s_5(s_1+s_2+s_3+s_4)} = e^{K(s_1+s_2+s_3+s_4)} + e^{-K(s_1+s_2+s_3+s_4)}.$$

Das allgemeinste, mit den Symmetrien verträgliche Boltzmann-Gewicht von 4 Spins hat die Form

$$e^{2g} \exp \left(\frac{1}{2} K'_1 \underbrace{(s_1 s_2 + s_2 s_3 + s_3 s_4 + s_4 s_1)}_{\text{NN}} + K'_2 \underbrace{(s_1 s_3 + s_2 s_4)}_{\text{üNN}} + K'_3 \underbrace{(s_1 s_2 s_3 s_4)}_{\text{Q}} \right),$$

wobei (NN) für nächste Nachbarn, (üNN) für übernächste Nachbarn und (Q) für Quadrate steht. Wir finden folgende unabhängige Gleichungen für die Kopplungskonstanten K'_i :

$$\begin{aligned} (s_1, s_2, s_3, s_4) = (1, 1, 1, 1) : & \quad 2 \cosh(4K) = e^{2g} e^{2K'_1+2K'_2+K'_3} \\ (s_1, s_2, s_3, s_4) = (1, -1, -1, -1) : & \quad 2 \cosh(2K) = e^{2g} e^{-K'_3} \\ (s_1, s_2, s_3, s_4) = (1, 1, -1, -1) : & \quad 2 = e^{2g} e^{-2K'_2+K'_3} \\ (s_1, s_2, s_3, s_4) = (1, -1, 1, -1) : & \quad 2 = e^{2g} e^{-2K'_1+2K'_2+K'_3}. \end{aligned}$$

Die Auflösung führt auf die RG-Transformation

$$\begin{aligned} K'_1 &= 2K'_2 = \frac{1}{4} \log \cosh(4K) \\ K'_3 &= \frac{1}{8} \log \cosh(4K) - \frac{1}{2} \log \cosh(2K) \\ g &= \frac{1}{16} (\log \cosh(4K) + \log \cosh(2K) + 8 \log 2). \end{aligned} \tag{11.14}$$

Wir erhalten $V/2$ derartige Beträge von den offenen Punkten. Dabei kommt zum Beispiel der Term $\exp(K'_1 s_1 s_2 / 2)$ auch bei der Summation über s_6 vor. Bezeichnen wir mit w' die Spinkonfigurationen auf dem verdünnten Gitter mit den vollen Gitterpunkten, dann ergibt sich für die Zustandssumme des verdünnten Systems,

$$Z(V, K) = Z' \left(\frac{V}{2}, K' \right) = \sum_{w'} e^{-(\beta H)'(w')} \tag{11.15}$$

mit der *Landau-Ginzburg-Wilson (LGW) Energiefunktion*

$$-(\beta H)' = Vg + K'_1 \sum_{\text{NN}} s_x s_y + K'_2 \sum_{\text{üNN}} s_x s_y + K'_3 \sum_{\text{Q}} s_x s_y s_u s_v, \quad (11.16)$$

wobei x, y, u, v Punkte auf dem verdünnten Gitter sind. Man sieht, dass der LGW-Hamiltonian H' nicht mehr die Form von H hat wie beim eindimensionalen Modell. Die Näherung $K'_2 = K'_3 = 0$ zu setzen ist zu grob. In dieser Näherung gibt es wie im eindimensionalen Modell nur die Fixpunkte $K_1 = 0$ und $K_1 = \infty$ und entsprechend keinen Phasenübergang. Eine akzeptable Näherung ist es, nur $K_3 = 0$ zu setzen und übernächste Nachbarn als nächste Nachbarn zu zählen,

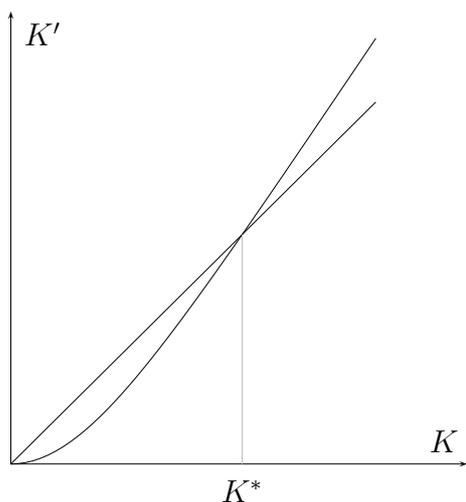
$$Z(V, K) = e^{Vg} \sum_{w'} \exp \left(K' \sum_{\text{NN}} s_{x'} s_{y'} \right), \quad K' = K'_1 + K'_2. \quad (11.17)$$

Die Transformation

$$K \longrightarrow K'(K) = \frac{3}{8} \log \cosh 4K \quad (11.18)$$

hat Fixpunkte bei $0, \infty$ und bei

$$K^* = 0.50698. \quad (11.19)$$



Dies ist nicht weit weg von exaktem Wert $K_c = 0.4407$. Der Fixpunkt K^* ist *instabil*. Startet man die Iteration für $K \neq K^*$, dann strebt K gegen den Hochtemperaturfixpunkt bei $K = 0$ oder den Tieftemperaturfixpunkt bei $K = \infty$. Es gibt verschiedene Näherungsverfahren der Konstruktion der RG-Transformation. Allen diesen Verfahren ist gemeinsam, dass mit einer endlichen Anzahl von Kopplungen gearbeitet wird. Beispiele von Ortsraum-RGT sind

- Kumulanten-Verfahren
- Finite-Cluster-Verfahren

- Migdal-Kadanov-Transformation
- Monte-Carlo-Renormierung.

Insbesondere die letzte Methode ergibt sehr präzise Werte für die kritischen Exponenten und soll weiter unten besprochen werden.

Anstelle der Spin-Variablen im Ortsraum kann man die Variablen im Impulsraum benutzen. Der Vorteil dieser Methode ist, dass für eine unendliches Raumgitter die Impulse kontinuierlich sind. Ist Λ ein reguläres Gitter, so liegen die Impulse in der kompakten Brillouin-Zone. Die Ausdünnung wird nun geschickterweise über die Freiheitsgrade zu den größten Impulswerten durchgeführt. Die entsprechenden Verfahren heißen Impulsraum-RGT, beziehungsweise feldtheoretische Verfahren. Der Dezimierungsparameter b kann kontinuierlich sein und beliebig dicht an 1 liegen. Beispiele von Impulsraum-RGT sind

- ϵ -Entwicklung
- Callan-Symanzik-Gleichung.

Noch vielfältiger als die Implementierung der Renormierungsgruppenidee ist die Literatur über diese Methode und ihre Anwendung auf eine Vielzahl physikalischer Systeme. In [49] und [50] findet man eine Auswahl von Originalarbeiten, Übersichtsartikel und Monographien über diese mächtige Methode in der statistischen Physik, Quantenfeldtheorie und Teilchenphysik.

Wir wollen nun der Frage nachgehen, welche allgemeinen Eigenschaften des betrachteten physikalischen Systems aus der zugehörigen Renormierungsgruppentransformation gewonnen werden können.

11.2 Fixpunkte

Wir wenden uns nun der allgemeineren Diskussion der RG-Methoden zu. Wir betrachten ein d -dimensionales Gittermodell mit Kopplungskonstanten

$$K = \{K_A | A \subset \Lambda\} = (K_1, K_2, \dots), \quad (11.20)$$

wobei wir die Teilmengen des Gitters (worin ein $x \in A$ mehrmals auftreten darf) durchnummerierten. Diese Menge von Kopplungskonstanten sei vollständig in folgendem Sinne: Bei einer RG-Transformation, welche b^d Freiheitsgrade durch einen

Freiheitsgrad ersetzt, habe die Energiefunktion für die reduzierten Freiheitsgrade dieselbe Art von Wechselwirkungen wie die Energiefunktion des ursprünglichen Systems. Für eine Energie der Form

$$H(w) = - \sum_{A \subset \Lambda} K_A s_A, \quad s_A = \prod_{x \in A} s_x, \quad (11.21)$$

soll der renormierte Energie bis auf eine extensive additive Konstante $-Vg(K)$ die gleiche funktionale Form haben,

$$H(w) \longrightarrow H'(w') - Vg(K), \quad H'(w') = - \sum_{A \subset \Lambda'} K'_A s_A \quad (11.22)$$

mit denselben Mengen A haben. Es wird dabei stillschweigend angenommen, dass die Mengen $\{A\}$ sowohl auf dem ursprünglichen wie auch auf dem verdünnten Gitter existieren und dass die reduzierten Freiheitsgrade $s_{x'}$ dieselben algebraischen Eigenschaften wie die s_x haben. Steht $\{A\}$ zum Beispiel für die Paare nächster Nachbarn, dann soll gelten

$$\sum_{\langle xy \rangle} K_{xy} s_x s_y \longrightarrow \sum_{\langle x'y' \rangle} K'_{x'y'} s_{x'} s_{y'}. \quad (11.23)$$

Der konstante Beitrag $Vg(K)$ in (11.22) entsteht in allen RG-Transformationen. Leider kommt man nur für einfache Systeme wie das eindimensionale Ising-Modell mit einer endlichen Anzahl Kopplungskonstanten aus. Aber die berechnete Annahme ist, dass die K_A zu langreichweitigen Wechselwirkungen (großen Mengen A) sehr klein sind und vernachlässigt werden können. In der Praxis arbeitet man mit einer endlichen Anzahl Konstanten $\{K_1, \dots, K_n\}$.

Bei der Ausdünnung des Systems ändern sich die Kopplungskonstanten gemäß der *Renormierungsgruppenabbildung*

$$K'_i = R_i(K_1, K_2, \dots). \quad (11.24)$$

Dabei bleibt die Zustandssumme unverändert,

$$e^{-F(V,K)} = \sum_{w \in \Omega} e^{-H(w)} = e^{Vg(K)} \sum_{w' \in \Omega'} e^{-H'(w')} = e^{Vg(K) - F(V',K')}. \quad (11.25)$$

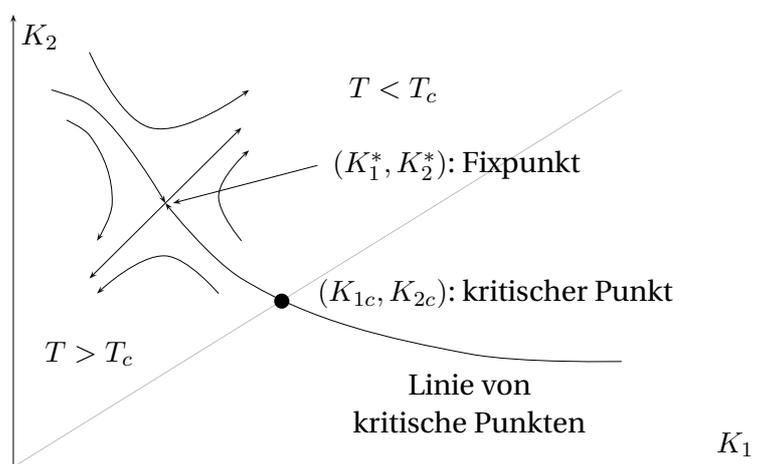
Wir wollen wieder annehmen, dass der thermodynamische Grenzfall $V \rightarrow \infty$ existiert. Für die freien Energiedichten der beiden Systeme im thermodynamischen Grenz-

fall ergibt sich dann folgende Rekursionsrelation

$$f(K) = b^{-d}f(K') - g(K), \quad V = b^d V', \quad (11.26)$$

die uns schon bei der Diskussion der Isingkette in (11.4) begegnete.

Wir argumentierten bereits, dass *Fixpunkte* der Rekursionsrelation entweder zu kritischen Systemen mit $\xi_c = \infty$ oder zu nicht-wechselwirkenden Systemen mit $\xi = 0$ gehören. Die Umkehrung gilt nicht. Es kann kritische Punkte geben, die keine Fixpunkte sind. Wir betrachten einen 2-dimensionalen Raum von Kopplungskonstanten (K_1, K_2) mit einem kritischen Punkt $K_c = (K_{1c}, K_{2c})$. Im generischen Fall liegt dieser kritische Punkt auf einer Kurve von kritischen Punkten, wie in der folgenden Abbildung skizziert.



Zur Begründung betrachten wir Systeme mit verschiedenen Verhältnissen K_2/K_1 von übernächsten- zu nächsten-Nachbarn Wechselwirkungen. Die kritische Temperatur T_c wird von diesem Verhältnis abhängen. Wenn das Verhältnis K_2/K_1 verändert wird, beschreibt der Punkt

$$(K_{1c}, K_{2c}) = \left(\frac{J_1}{T_c}, \frac{J_2}{T_c} \right)$$

eine Kurve in der (K_1, K_2) -Ebene. Jeder Punkt auf der Kurve gehört zu einem kritischen Punkt eines speziellen Modells in der Familie von Energiefunktionen.

Nun wollen wir versuchen, die Eigenschaften des System mit dem RG-Fluss in Verbindung zu bringen. Der RG-Fluss hat einige einfache Eigenschaften:

- Trajektorien werden sich der kritischen Fläche nicht nähern, da einerseits auf der Fläche $\xi = \infty$ ist, sich andererseits bei jeder RG-Iteration ξ verkleinert.

- Bei einer RG-Transformation wird das System die Phase nicht wechseln, da bei einer Verdünnung Ordnung nicht in Unordnung übergehen kann und umgekehrt.
- Startet man bei $T > T_c$ so strebt die Temperatur bei wiederholter Iteration gegen den (freien) Fixpunkt bei $T = \infty$, startet man bei $T < T_c$ so endet man im (Grundzustands-) Fixpunkt $T = 0$.
- Startet man dagegen auf der kritischen Fläche, so bleibt man auf dieser Fläche, da $\xi' = \xi/b$ unendlich ist für $\xi = \infty$.
- Nur in Ausnahmefällen sind alle kritischen Punkte stationäre Punkte des RG-Flusses, also Fixpunkte. In fast allen Systemen gibt es eine endliche Menge von isolierten Fixpunkten.

Es sei nun $K^* = (K_1^*, K_2^*, \dots)$ ein Fixpunkt der RG-Transformation,

$$K^* = R(K^*). \quad (11.27)$$

Wir betrachten den Renormierungsgruppen-Fluss in der Umgebung von K^* und schreiben $K = K^* + \delta K$. In der ersten Ordnung in der Abweichung vom Fixpunkt lautet die RG-Transformation

$$K'_i = K_i^* + \delta K'_i = R_i(K_j^* + \delta K_j) = K_i^* + \left. \frac{\partial R_i}{\partial K_j} \right|_{K^*} \delta K_j + O(\delta K^2),$$

und wir finden die linearisierte Transformation

$$\delta K'_i = \sum_j M_i^j \delta K_j, \quad M_i^j = \left. \frac{\partial R_i}{\partial K_j} \right|_{K^*}. \quad (11.28)$$

Nun suchen wir die Eigenwerte und Links-Eigenvektoren der linearisierten Abbildung,

$$\sum_j \Phi_\alpha^j M_j^i = \lambda_\alpha \Phi_\alpha^i = b^{y_\alpha} \Phi_\alpha^i. \quad (11.29)$$

In der letzten Formel haben wir den Eigenwert λ_α durch b^{y_α} ersetzt. Dies ist angezeigt, da wegen der Halbgruppeneigenschaft der RG-Transformation

$$\lambda_\alpha(b) \lambda_\alpha(b) = \lambda_\alpha(b^2)$$

gelten muss. Nun betrachten wir die neuen Variablen

$$g_\alpha = \sum_i \Phi_\alpha^i \delta K_i. \quad (11.30)$$

Es sind die Projektionen von δK auf die Eigenvektoren Φ_α . Es gilt

$$g'_\alpha = \sum_i \Phi_\alpha^i \delta K'_i = \sum_{ij} \Phi_\alpha^i M_i^j \delta K_j = \sum_j b^{y_\alpha} \Phi_{\alpha j} \delta K_j = b^{y_\alpha} g_\alpha. \quad (11.31)$$

Beim zwei-dimensionalen System muss ein Eigenvektor, zum Beispiel Φ_2 , tangential zur kritischen Kurve sein. Der andere Eigenvektor Φ_1 ist dann transvers zur Kurve.

Wir kehren zur Rekursionsrelation (11.26) für die freie Energiedichte zurück. Der Anteil $g(K)$ kommt von der Ausintegration der kurzwelligen Fluktuationen und ist eine *glatte Funktion*. Damit erfüllt der singuläre Anteil der freien Energiedichte die homogene Relation

$$f_s(K) = b^{-d} f_s(K'). \quad (11.32)$$

In der Nähe des Fixpunktes linearisieren wir und erhalten folgendes Skalenverhalten für die freie Energiedichte,

$$f_s(K^* + \delta K) = b^{-d} f_s(K^* + \delta K'). \quad (11.33)$$

Im Folgenden schreiben wir nicht immer das Argument K^* und setzen

$$f_s(K^* + \delta K) \equiv f_s(g_1, g_2, \dots), \quad \delta K \stackrel{(11.30)}{=} \delta K(g).$$

Nach ℓ -maliger Iteration der RG-Transformation finden wir

$$f_s(g_1, g_2, \dots) = b^{-d\ell} f_s(b^{\ell y_1} g_1, b^{\ell y_2} g_2, \dots). \quad (11.34)$$

Je nach Vorzeichen des Exponenten y_α finden wir ein unterschiedliches Verhalten:

- Für $y_\alpha > 0$ wächst die Abweichung g_α beständig und der RG-Fluß trägt den Punkt $K^* + g_\alpha$ vom Fixpunkt weg. Es handelt sich hier um eine *relevante Störung*.
- Für $y_\alpha < 0$ schrumpft die Abweichung g_α und der RG-Fluß führt den Punkt $K^* + g_\alpha$ zum Fixpunkt hin. Es handelt sich um eine *irrelevante Störung*.
- Die Störungen mit $y_\alpha = 0$ nennt man *marginale Störungen*.

Relevante Störungen sind üblicherweise die Temperatur und das Magnetfeld, bzw. die dimensionslosen Größen

$$t = \frac{T - T_c}{T_c} \equiv g_1 \quad \text{und} \quad \beta h = g_2. \quad (11.35)$$

Wir wollen die Resultate noch etwas umdeuten. Die Renormierungsgruppentransformation wirkt auf dem Raum der Kopplungskonstanten oder äquivalent dazu auf dem Raum \mathcal{H} der Wechselwirkungen bzw. Energiefunktionen,

$$R_b : \mathcal{H} \longrightarrow \mathcal{H}.$$

Dies ist im Allgemeinen ein ∞ -dimensionaler Raum. Wir betrachten wieder die allgemeine Klasse von Energiefunktionen in (11.21),

$$H = - \sum_{A \subset \Lambda} K_A s_A \equiv - \sum K_i O_i. \quad (11.36)$$

In der Nähe des Fixpunktes kann sie entwickelt werden, $H = H^* + \delta H$, mit

$$H^* = - \sum K_i^* O_i \quad \text{und} \quad \delta H = - \sum \delta K_i O_i = - \sum_{\alpha} g_{\alpha} Q_{\alpha}. \quad (11.37)$$

Nach ℓ -maliger Iteration der RG-Transformation ändert $H \in \mathcal{H}$ wie folgt,

$$\begin{aligned} H^* + \delta H &\longrightarrow H^* - \sum g'_{\alpha} Q_{\alpha} \longrightarrow H^* - \sum g''_{\alpha} Q_{\alpha} \longrightarrow \dots \\ &\longrightarrow H^* - \sum_{\alpha} b^{\ell y_{\alpha}} g_{\alpha} Q_{\alpha}. \end{aligned}$$

Die Q_{α} heissen *Skalen-'Operatoren'* und die g_{α} *Skalenfelder*. Entsprechend heissen die Operatoren mit positiven y_{α} relevant, mit $y_{\alpha} < 0$ irrelevant und mit $y_{\alpha} = 0$ marginal. Im Ising-Modell sind das mittlere Feld $\sum s_i$ und die Energie H relevante Operatoren.

11.2.1 Herleitung der Skalengesetze

Wir wollen hier annehmen, dass $g_1 = t$ und $g_2 = \beta h$ relevant und g_3, g_4, \dots irrelevant sind und wählen ℓ derart, dass

$$b^{y_1 \ell} = \frac{1}{t}, \quad \text{d.h.} \quad b^{\ell} = t^{-1/y_1} \quad (11.38)$$

ist. Wir folgern, dass

$$f_s(K^* + \delta K) \equiv f_s(t, h, g_3, \dots) = t^{d/y_1} f_s \left(1, \frac{h}{t^{y_2/y_1}}, \frac{g_3}{t^{y_3/y_1}}, \dots \right) \quad (11.39)$$

gelten muss. Ganz analog schliesst man auf die Beziehung

$$f_s(t, h, g_3, \dots) = h^{d/y_2} f_s \left(\frac{t}{h^{y_1/y_2}}, 1, \frac{g_3}{h^{y_3/y_2}}, \dots \right). \quad (11.40)$$

Man beachte, dass in der Nähe des Fixpunktes die letzten Argumente der freien Energiedichte f_s auf den rechten Seiten gegen Null streben,

$$\frac{g_i}{t^{y_i/y_1}} \xrightarrow{t \rightarrow 0} 0 \quad \text{und} \quad \frac{g_i}{h^{y_i/y_2}} \xrightarrow{h \rightarrow 0} 0, \quad i = 3, 4, \dots \quad (11.41)$$

Durch mehrmaliges Ableiten nach den relevanten Kopplungen t und h erhält man den Zusammenhang zwischen kritischen Exponenten und den Eigenwerten der linearisierten RG-Transformation (11.28).

Wir erinnern an die wichtigsten thermodynamischen Größen aus dem dritten Kapitel:

$$\text{Magnetisierung:} \quad m(t, h) = \langle s_x \rangle = -\frac{\partial f}{\partial h} \quad (11.42)$$

$$\text{Suszeptibilität:} \quad \chi(t, h) = \beta \sum_x \langle s_0 s_x \rangle_c = -\frac{\partial^2 f}{\partial h^2} \quad (11.43)$$

$$\text{innere Energiedichte:} \quad u(t, h) = \lim_{\Lambda \rightarrow \mathbb{Z}^d} \frac{1}{V} \langle H \rangle = \frac{\partial(\beta f)}{\partial \beta} \quad (11.44)$$

$$\text{spezifische Wärme:} \quad c(t, h) = \frac{\partial u}{\partial T} = -\beta^2 \frac{\partial u}{\partial \beta} = -T \frac{\partial^2 f}{\partial T^2}. \quad (11.45)$$

Diese im Bereich der makroskopischen Thermodynamik definierbaren Größen haben folgende kritische Exponenten:

$$c(t, 0) \sim E_{\pm} |t|^{-\alpha}, \quad m(t, 0) \sim B t^{\beta} \quad (11.46)$$

$$\chi(t, 0) \sim A_{\pm} |t|^{-\gamma}, \quad \chi(0, h) \sim |h|^{-1/\delta} \text{sign}(h). \quad (11.47)$$

Daneben gibt es noch zwei weitere kritische Exponenten η und ν , die mit der Korrelationslänge und Zweipunktsfunktion verknüpft sind,

$$\text{Korrelationslänge:} \quad \xi^{-1} = - \lim_{|x| \rightarrow \infty} \frac{1}{|x|} \log \langle s_0 s_x \rangle_c \sim |t|^{\nu} \quad (11.48)$$

$$\text{Greensfunktion: } \langle s_0 s_x \rangle \sim \frac{1}{|x|^{d-2+\eta}} \quad (11.49)$$

Jede Korrelationsfunktion, die am kritischen Punkt langreichweitiges Verhalten zeigt, erlaubt die Definition weiterer kritischer Exponenten. Der Exponent ν beschreibt das Divergieren der Korrelationslänge bei Annäherung an T_c . Das Potenzverhalten der Korrelationsfunktion ist durch η charakterisiert.

Die folgende Tabelle enthält für einige Phasenübergänge die wichtigsten kritischen Exponenten [53]:

	β – Messing	Fe	Ni	$3d$ – Ising
α	0.05 ± 0.06	-0.03 ± 0.12	0.04 ± 0.12	0.11
β	0.305 ± 0.005	0.37 ± 0.01	0.358 ± 0.003	0.32
γ	1.25 ± 0.02	1.37 ± 0.015	1.33 ± 0.02	1.24
δ		4.3 ± 1	4.29 ± 0.05	4.8
η	0.08 ± 0.07	0.07 ± 0.04	0.041 ± 0.01	0.05
ν	0.65 ± 0.02	0.69 ± 0.02	0.64 ± 0.1	0.63

Mit dem Skalierungsverhalten (11.39,11.40) der freien Energie können wir nun einen Zusammenhang zwischen den kritischen Exponenten und den Eigenwerten der linearisierten RG-Transformation finden. So ist die spezifische Wärme proportional zur zweiten Ableitung von f bezüglich t , also

$$f_s \sim |t|^{2-\alpha}. \quad (11.50)$$

Der Vergleich mit (11.39) führt dann auf $2-\alpha = d/y_1$. Ganz ähnlich argumentiert man für die kritischen Exponenten β, γ und δ . Um die kritischen Exponenten der Korrelationsfunktionen zu finden, muss man die RGT auf Modelle mit räumlich inhomogenen Magnetfeld $h(r)$ anwenden. Man findet die wichtigen Relationen

$$\begin{aligned} 2 - \alpha &= \frac{d}{y_1}, & \beta &= \frac{d - y_2}{y_1} \\ \gamma &= \frac{2y_2 - d}{y_1}, & \frac{1}{\delta} &= \frac{d - y_2}{y_2} \\ \nu &= \frac{1}{y_1}, & d - 2 + \eta &= 2(d - y_2) \end{aligned} \quad (11.51)$$

Damit haben wir die *Skalenrelationen* $\alpha, \beta, \gamma, \delta, \nu, \eta \longleftrightarrow y_1, y_2$ gefunden. Die Expo-

nenten beschreiben das Verhalten des Systems bei Abweichungen vom kritischen Punkt und die y_α sind die Eigenwerte der linearisierten RG-Transformation am Fixpunkt. Da alle kritischen Exponenten nur von y_1 und y_2 abhängen, gibt es sogenannte *Skalenrelationen im engeren Sinne*,

$$\begin{aligned}
 \gamma &= \nu(2 - \eta) && \text{(Fisher)} \\
 \alpha + 2\beta + \gamma &= 2 && \text{(Rushbrooke)} \\
 \gamma &= \beta(\delta - 1) && \text{(Widom)} \\
 \nu d &= 2 - \alpha && \text{(Josephson, 'Hyperskalen-Relation')}.
 \end{aligned}
 \tag{11.52}$$

Für einige wichtige Modelle gilt

	α	β	γ	δ	η	ν
Ising $d = 2$	0	1/8	7/4	15	1/4	1
Ising $d = 3$	0.11	0.32	1.24	4.8	0.05	0.63
klass. Heisenberg $d = 3$	-0.12	0.36	1.37	4.6	0.04	0.7
MFA, beliebiges d	0	1/2	1	3	0	1/2

(11.53)

Wir bemerken, dass die Skalenrelationen für alle aufgelisteten Modelle erfüllt sind, bis auf die Molekularfeldapproximation. Wir schliessen daraus, dass diese Approximation zur Beschreibung des kritischen Verhaltens für $d < 4$ Dimensionen ungeeignet ist.

Man beachte die *Universalität* des kritischen Verhaltens: kritische Exponenten hängen nicht von den mikroskopischen Details der Wechselwirkung ab, da am kritischen Punkt die Korrelationslänge divergiert. Die Universalität kommt davon, dass das asymptotischen Verhalten der freien Energie unabhängig von den irrelevanten Kopplungen $g_i, i \geq 3$ ist, da z.B. t^{-y_3/y_1} am Fixpunkt verschwindet. In anderen Worten: Alle Systeme, deren Energiefunktion unter dem RG-Fluss zum gleichen kritischen Fixpunkt fließen haben identische kritische Exponenten.

Irrelevante Parameter sind die Reichweite der Wechselwirkung (solange endlich), Mehrspinwechselwirkungen (solange symmetrieehaltend) und Gitterstruktur. Relevant sind die Dimensionalität d des Raumes, die Anzahl n der Komponenten des lokalen Ordnungsparameters und Symmetrie der Wechselwirkung.

11.3 Blockspintransformation

Die Monte-Carlo-Renormierungsgruppenmethoden (MCRG-Methoden) wurden von MA, SWENDSEN und anderen entwickelt [54]. Für 2–dimensionale Ising-artige Modelle auf dem quadratischen Gitter mit Energiefunktion

$$\beta H = - \sum_{A \subset \Lambda} K_A s_A, \quad K_A = \beta J_A, \quad s_A = \prod_{x \in A} s_x, \quad (11.54)$$

wählt man eine etwas andere Transformation als wir sie für das 1-dimensionale Ising-Modell gewählt haben. Wir wollen wieder periodische Randbedingungen voraussetzen und der Einfachheit halber Ising-artige Modelle mit $s_x \in \{\pm 1\}$ untersuchen. Wir absorbieren die inverse Temperatur in den Kopplungskonstanten K_A und werden in diesem Abschnitt H anstelle von βH schreiben, d.h. wir setzen $\beta = 1$.

Nun unterteilen wir das Gitter Λ in Blocks der Größe b^2 und ordnen den Spins in jedem Block einen *Blockspin* auf einem verdünnten Gitter zu. Die folgende Abbildung zeigt eine mögliche Blockbildung mit linearem Verdünnungsfaktor $b = 2$. Die

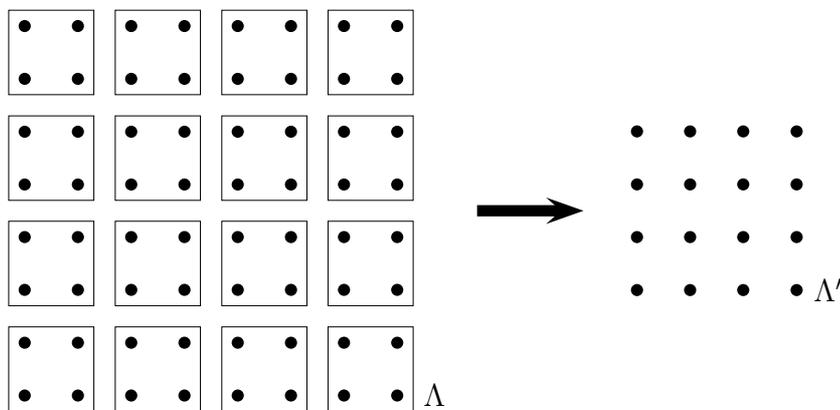


Abbildung 11.1: Jeweils vier Spins werden zu einem Blockspin zusammengefasst.

Punkte des quadratischen Gitters Λ seien x mit $x_1, x_2 \in \{1, 2, \dots, N\}$. Ein Block aus b^2 benachbarten Punkten wird dann ein Gitterpunkt x' des geblockten und größeren Gitters zugeordnet,

$$x'(x) = (x'_1(x_1), x'_2(x_2)) = (\text{ceil}(x_1/b), \text{ceil}(x_2/b)).$$

Für $b = 2$ werden beispielsweise die Punkte $(1, 1)$, $(1, 2)$, $(2, 1)$ und $(2, 2)$ in den Punkt $(1, 1)$ auf dem größeren Gitter Λ' abgebildet. Die Größe des geblockten Gitters ist N/b . Die Blockspintransformation, die jeder Spinkonfiguration $w = \{s_x\} \in \Omega$ auf Λ eine

Konfiguration $w' = \{S_{x'}\} \in \Omega'$ auf dem geblockten Gitter Λ' zuordnet, ist durch den *Blockkern* $T(w', w)$ in

$$w' = \sum_{w \in \Omega} T(w', w) \quad (11.55)$$

bestimmt. $T(w', w)$ ist die Wahrscheinlichkeit dafür, dass der Konfiguration w die Blockspinkonfiguration w' zugeordnet wird. Der Kern sollte folgende Bedingungen erfüllen,

$$0 \leq T(w', w) \leq 1 \quad \text{und} \quad \sum_{w'} T(w', w) = 1. \quad (11.56)$$

Beim Übergang vom feineren zum größeren Gitter definieren wir die Energie für die Blockspins wie folgt,

$$e^{-H'(w')} = \sum_{w \in \Omega} T(w', w) e^{-H(w)} \quad (11.57)$$

Für das 1-dimensionale Ising-Modell war

$$T(w', w) = \prod_{x'=1,3,\dots} \delta(s_{2x}, S_{x'}).$$

Zwei benachbarten Spins s_{2x-1} und s_{2x} wurde der Blockspin $S_{x'} = s_{2x-1}$ zugeordnet. Wir wollen nun annehmen, dass die Energiefunktion für die Blockspins wieder in der Form

$$H'(w') = - \sum_{A' \subset \Lambda'} K_{A'} S_{A'} \quad (11.58)$$

geschrieben werden kann. Unser Ziel ist es, eine Rekursionrelation für die Kopplungskonstanten K zu finden.

Die erste Bedingung in (11.56) sorgt dafür, dass die rechte Seite in (11.57) niemals negativ wird und deshalb als Exponent einer reellen Funktion der w' geschrieben werden kann. Wegen der zweiten Bedingung in (11.56) ändert sich die Zustandssumme bei dieser Transformation nicht,

$$Z'_{H'} = \sum_{w' \in \Omega'} e^{-H'(w')} = \sum_{w' \in \Omega'} \sum_{w \in \Omega} T(w', w) e^{-H(w)} = \sum_{w \in \Omega} e^{-H(w)} = Z_H. \quad (11.59)$$

Wir erinnern daran, dass die verbundenen Korrelationsfunktionen der s_A durch Ab-

leiten von $\log Z$ nach den entsprechenden Kopplungen gewonnen werden können. Zum Beispiel die Einpunkt- und verbundenen Zweipunktfunktionen,

$$\begin{aligned}\langle s_A \rangle &= \frac{\partial \log Z}{\partial K_A} \\ \langle s_A; s_B \rangle &\equiv \langle s_A s_B \rangle - \langle s_A \rangle \langle s_B \rangle = \frac{\partial \langle s_A \rangle}{\partial K_B}.\end{aligned}\quad (11.60)$$

Die Korrelationsfunktionen des geblockten Systems können im ursprünglichen oder im geblockten System berechnet werden,

$$\langle S_{A'} \rangle' \equiv \frac{\sum_{w'} S_{A'} e^{-H'(w')}}{\sum_{w'} e^{-H'(w')}} \quad (11.61)$$

$$= \frac{\sum_{w'} S_{A'} \sum_w T(w', w) e^{-H(w)}}{\sum_w e^{-H(w)}} \quad (11.62)$$

Bei Kenntnis der geblockten Energiefunktion H' könnten wir Erwartungswerte von Funktionen der geblockten Spins gemäß (11.61) berechnen. Ist nur die Energiefunktion H des ursprünglichen Systems und der Blockkern T bekannt, so wird man sie mit Hilfe der Formel (11.62) berechnen.

Es sei nun $T_{A'B}$ die Ableitung des Erwartungswertes $\langle S_{A'} \rangle'$ im geblockten System nach den Kopplungskonstante K_B des ungeblockten Systems, also

$$\begin{aligned}T_{A'B} &= \frac{\partial \langle S_{A'} \rangle'}{\partial K_B} = \frac{\partial}{\partial K_B} \frac{\sum_{w'} S_{A'} \sum_w T(w', w) e^{-H(w)}}{\sum_w e^{-H(w)}} \\ &= \frac{\sum_w \{ \sum_{w'} S_{A'} T(w', w) \} s_B e^{-H(w)}}{\sum_w e^{-H(w)}} - \langle S_{A'} \rangle' \langle s_B \rangle.\end{aligned}$$

Also gilt

$$T_{A'B} = \left\langle \left(\sum_{w'} S_{A'} T(w', w) \right) s_B \right\rangle - \langle S_{A'} \rangle' \langle s_B \rangle. \quad (11.63)$$

Die Erwartungswerte auf der rechten Seite können nun in einer Monte-Carlo Simulation berechnet werden. Sie hängen ab von den Kopplungskonstanten auf dem feinen Gitter und vom Blockkern T . Nach der Kettenregel gilt auch

$$T_{A'B} = \frac{\partial \langle S_{A'} \rangle'}{\partial K_B} = \sum_{C'} \frac{\partial \langle S_{A'} \rangle'}{\partial K_{C'}} \frac{\partial K_{C'}}{\partial K_B} = \sum_{C'} \langle S_{A'}; S_{C'} \rangle \frac{\partial K_{C'}}{\partial K_B}. \quad (11.64)$$

Die verbundenen Korrelationsfunktionen auf der rechten Seite können nun ebenfalls

mit Hilfe einer Simulation bestimmt werden. Mit $T_{A'B}$ aus (11.63) kann man nun (im Prinzip) die Ableitung der neuen nach den alten Kopplungskonstanten berechnen.

Um etwas konkreter zu werden, wollen wir die MCRG-Transformation für das $2d$ -Ising-Modell explizit durchführen. Wir fassen jeweils vier Spins zu einem Blockspin zusammen, wie in der Abbildung 11.1 angedeutet. Nun müssen wir den Blockkern festlegen. Wir wählen die *Mehrheitsregel*: Für 4 Spins $\{s_x\}$ die zu einem Blockspin $S_{x'}$ zusammengefasst werden, wählen wir

$$T(w', w) = \prod_{x' \in \Lambda'} t\left(S_{x'}, \sum_{x \in x'} s_x\right), \quad (11.65)$$

mit

$$\begin{aligned} \sum s_x > 0 &\implies S_{x'} = 1 && \text{mit Wahrscheinlichkeit } 1 \\ \sum s_x < 0 &\implies S_{x'} = -1 && \text{mit Wahrscheinlichkeit } 1 \\ \sum s_x = 0 &\implies \begin{cases} S_{x'} = 1 & \text{mit Wahrscheinlichkeit } 1/2 \\ S_{x'} = -1 & \text{mit Wahrscheinlichkeit } 1/2 \end{cases} \end{aligned} \quad (11.66)$$

Weiter unten berechnen wir die Renormierung der Kopplungskonstanten für das $2d$ -Ising-Modell ohne Magnetfeld auf dem 4×4 Gitter. Die $2^{16} = 65536$ Konfigurationen w können auf dem Computer leicht erzeugt werden. Die Definition (11.57) gestattet dann eine direkte Berechnung der geblockten Energie H' . Im Gegensatz zum eindimensionalen Fall können wir nicht mehr erwarten, dass H' die gleich funktionale Form wie H hat. In mehr als einer Raumdimension treffen wir auf die Komplikation, dass die RG-Prozedur schon für einfache Modelle mit nächsten-Nachbarn-Wechselwirkungen längerreichweitige Wechselwirkungen und Mehr-Spin-Wechselwirkungen erzeugt.

Auf dem geblockten 2×2 Gitter gibt es nur 3 unterschiedliche Wechselwirkungsterme: die Wechselwirkung zwischen nächsten Nachbarn, zwischen übernächsten Nachbarn und die Wechselwirkung aller 4 Spins,

$$\begin{aligned} H' = & - K_1 \sum_{x'} S_{x'} (S_{x'+(1,0)} + S_{x'+(0,1)}) \\ & - K_2 \sum_{x'} S_{x'} (S_{x'+(1,1)} + S_{x'+(1,-1)}) \\ & - K_3 \sum_{x'} S_{x'} S_{x'+(1,0)} S_{x'+(0,1)} S_{x'+(1,1)} \\ & - K_4 \sum_{x'} 1. \end{aligned} \quad (11.67)$$

Wir haben absichtlich überzählt, da auf größeren Gittern zum Beispiel die beiden Terme in der zweiten Zeile nicht mehr identisch sind. Auf größeren 2×2 -Gitter Λ' gibt es nur $2^4 = 16$ Konfigurationen und davon haben nur 4 Klassen verschiedene Boltzmann-Gewichte. Diese sind in der folgenden Tabelle angegeben:

Kl.	Konfigurationen								$-H'$
\mathcal{C}_1	++	--							$8K_1 + 8K_2 + 4K_3 + 4K_4$
\mathcal{C}_2	++	--							$-4K_3 + 4K_4$
\mathcal{C}_3	++	--							$-8K_2 + 4K_3 + 4K_4$
\mathcal{C}_4	++	--							$-8K_1 + 8K_2 + 4K_3 + 4K_4$

Damit haben wir 4 Gleichungen für die 4 Variablen K_1, K_2, K_3 und K_4 . Im folgenden Programm wählten wir aus jeder der 4 Klassen von Konfigurationen die erste aus. Die Gleichungen lauten dann

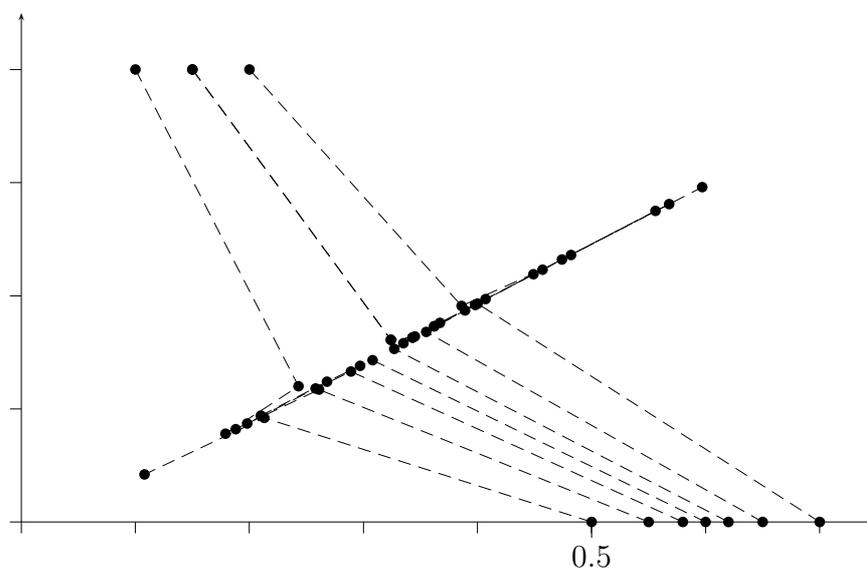
$$e^{-H'(w'_i)} = \sum_w T(w'_i, w) e^{-H(w)} \equiv e^{c_i}, \quad i = 1, 2, 3, 4.$$

Die rechten Seiten werden numerisch berechnet und die linken Seiten können für $w'_i \in \mathcal{C}_i$ aus der obigen Tabelle abgelesen werden. Die Auflösung der Gleichungen ergibt (siehe HASENBUSCH)

$$\begin{aligned} K_1 &= \frac{1}{16}(c_1 - c_4) \\ K_2 &= \frac{1}{32}(c_1 - 2c_3 + c_4) \\ K_3 &= \frac{1}{32}(c_1 - 4c_2 + 2c_3 + c_4) \\ K_4 &= \frac{1}{32}(c_1 + 4c_2 + 2c_3 + c_4) \end{aligned}$$

Zur Iteration der RG-Transformation benutzen wir die berechneten Kopplungen wieder auf dem 4×4 -Gitter.

Die folgende Figur¹ zeigt die Projektion der RG-Flusses auf die K_1, K_2 -Ebene. Der Fluss wurde mit dem Programm in Abschnitt 11.6 berechnet. Die Menge aller Punkte im Raum der Kopplungskonstanten, die nach unendlich vielen Transformationen in den Fixpunkt streben heisst *kritische Fläche*. Der Schnittpunkt der kritischen Fläche mit der Linie $(K_1, 0, 0)$ ist die kritische Kopplung des $2d$ -Ising-Modells auf dem quadratischen Gitter mit NN-Wechselwirkung.



Der Fixpunkt der RG-Transformation bei

$$K^* = (K_1^*, K_2^*, K_3^*) = (0.29976, 0.08709, -0.00123).$$

Genauere Werte finden sie auf der Homepage von M. HASENBUSCH². Die kritische Kopplung des $2d$ -Ising-Modells mit NN-Wechselwirkung ist bei

$$K_{1,c} = 0.4182,$$

also nicht weit weg vom exakten Wert $\frac{1}{2} \log(1 + \sqrt{2}) \approx 0.4407$. Um die kritischen Exponenten zu erhalten, muss man die linearisierten RG-Transformation in der Nähe des Fixpunktes K^* untersuchen, also die Matrix

$$T_{ab} = \left. \frac{\partial K'_a}{\partial K_b} \right|_{K^*}. \quad (11.68)$$

¹Programm muss noch verbessert werden!

²<http://www-zeuthen.desy.de/~hasenbus/lecture.html>

Die Berechnung des entsprechenden Differenzenquotienten bei Annäherung des Fixpunktes ergibt

$$T = \begin{pmatrix} 1.3590 & 1.5560 & 0.6020 \\ 0.4342 & 0.7490 & 0.1947 \\ -0.0045 & -0.0099 & 0.1314 \end{pmatrix}. \quad (11.69)$$

Um die kritischen Exponenten zu finden, müssen wir diese nicht-symmetrische Matrix diagonalisieren,

$$\sum_a \Phi_a^i T_{ab} = \lambda^i \Phi_b^i.$$

Man findet

$$\begin{aligned} \lambda_1 &= 1.9281 \quad , \quad \Phi^1 = (0.6051, 0.7961, 0.2890) \\ \lambda_2 &= 0.1789 \quad , \quad \Phi^2 = (-0.4091, 1.1049, -0.6543) \\ \lambda_3 &= 0.1324 \quad , \quad \Phi^3 = (-0.1814, 0.6131, 9.7332). \end{aligned}$$

und damit für die Exponenten y_i in

$$\lambda_i = b^{y_i}, \quad b = 2,$$

die Werte

$$\frac{1}{\nu} = y_1 \approx 0.947, \quad y_2 \approx -2.483, \quad y_3 \approx -2.917. \quad (11.70)$$

Für das \mathbb{Z}_2 -symmetrische Modell ohne Magnetfeld gibt es nur eine relevante Kopplung $g_1 \propto t$. Das trunkierte Modell hat zwei irrelevante Kopplungen g_2, g_3 mit negativen Exponenten. Da die zweite relevante Kopplung $g_2 \propto h$ ausgeschaltet ist, können wir von den Relationen (11.51) nur die Beziehung $\nu = 1/y_1$ testen. Die Näherung (11.70) für ν kommt dem exakten Resultat $\nu = 1$ für das zwei-dimensionale Isingmodell nahe. Die Vorhersage der Molekularfeld-Näherung lautet dagegen $\nu_{\text{MF}} = 0.5$.

11.4 Kontinuumsliches für freies Feld

Wir kehren zum freien Skalarfeld zurück und führen explizit eine Gitterkonstante a ein (in früheren Kapiteln oft mit ϵ bezeichnet) und studieren den *Kontinuumsliches* $a \rightarrow 0$ für die 2-Punktfunktion. Es ist hier vorteilhaft die Gitterpunkte mit $n \in \mathbb{Z}^d$ (statt mit x), die Impulse mit k (statt mit p) und den Parameter m mit m_L zu bezeichnen.

Ausgangspunkt unserer Betrachtungen ist die Fourierdarstellung (5.73)

$$G(n) = \frac{1}{(2\pi)^d} \int_{-\pi}^{\pi} d^d k \frac{e^{ikn}}{m_L^2 + \hat{k}^2}, \quad \hat{k}_\mu = 2 \sin \frac{k_\mu}{2}$$

in welcher wir nun $n = x/a$, $k = pa$ und $m_L = am$ setzen,

$$G(x) = \left(\frac{a}{2\pi}\right)^d \frac{1}{a^2} \int_B d^d p \frac{e^{ipx}}{m^2 + \hat{p}^2}, \quad \hat{p}_\mu = \frac{2}{a} \sin \frac{ap_\mu}{2}. \quad (11.71)$$

Die Impulsintegration erstreckt sich über die Brillouin-Zone $B = [-\pi/a, \pi/a]^d$, die im Kontinuumsliches gegen \mathbb{R}^d strebt. Diese Funktion erfüllt die lineare Differenzgleichung

$$-\sum_{\mu} (G(x + ae_{\mu}) - 2G(x) + G(x - ae_{\mu})) + (am)^2 G(x) = \left(\frac{a}{2\pi}\right)^d \int_B d^d p e^{ipx} = \delta_{x,0}.$$

Wir definieren nun die reskalierte 2-Punktfunktion

$$\tilde{G}_a(x) = \frac{1}{a^{d-2}} G(x) = \frac{1}{(2\pi)^d} \int_B d^d p \frac{e^{ipx}}{m^2 + \hat{p}^2}, \quad (11.72)$$

welche folgender Gleichung gehorcht,

$$-\sum_{\mu} \frac{1}{a^2} \left(\tilde{G}_a(x + ae_{\mu}) - 2\tilde{G}_a(x) + \tilde{G}_a(x - ae_{\mu}) \right) + m^2 \tilde{G}_a(x) = \frac{1}{a^d} \delta_{x,0}.$$

Die rechte Seite strebt im Kontinuumsliches gegen die Dirac-Distribution,

$$\frac{1}{a^d} \delta_{x,0} \xrightarrow{a \rightarrow 0} \delta(x), \quad (11.73)$$

und damit strebt diese Differenzgleichung gegen die lineare Differenzialgleichung

$$(-\Delta + m^2)\tilde{G}(x) = \delta^d(x), \quad \text{wobei} \quad \lim_{a \rightarrow 0} \tilde{G}_a = \tilde{G}. \quad (11.74)$$

Es ist die Bewegungsgleichung für die Zweipunktfunktion des freien Euklidischen Feldes mit Masse m . Dass das Integral (11.72) für die Zweipunktfunktion \tilde{G} für $a \rightarrow 0$ gegen

$$\frac{1}{(2\pi)^d} \int_{-\infty}^{\infty} d^d p \frac{e^{ipx}}{m^2 + p^2} \quad (11.75)$$

strebt, ist allerdings nicht offensichtlich. Bei Grenzübergang werden die Integrationsgrenzen zunehmend größer und man darf die Sinus-Funktion nicht einfach entwickeln. Man kann aber zeigen, dass für $x \neq 0$ die großen p -Werte zum Integral wegen der raschen Oszillation der Exponentialfunktion nicht beitragen. Abschließend einige Bemerkungen zu unserem Ergebnis:

- Die Reskalierung (11.72) der Greenschen Funktion entspricht einer *Feldrenormierung*. In der Euklidischen Wirkung auf \mathbb{Z}^d ,

$$S = \frac{1}{2} \sum_{\langle nm \rangle} (\phi(m) - \phi(n))^2 + \frac{m_L^2}{2} \sum_n \phi^2(n) \tag{11.76}$$

sind sowohl der Massenparameter m_L als auch das Gitterfeld ϕ dimensionslos. Beim Kontinuumsliches geht die Summe über alle Gitterpunkte in ein Integral über \mathbb{R}^d und die Differenz $\phi(m) - \phi(n)$ in eine Ableitung über. Die Gitterwirkung für das Gitterfeld $\phi(x) \equiv \phi(n)$ lautet

$$S = \frac{1}{2} \sum_{x \in (a\mathbb{Z})^d} \frac{a^d}{a^{d-2}} \left(\sum_{\mu=1}^d \frac{(\phi(x + ae_\mu) - \phi(x))^2}{a^2} + \frac{m_L^2}{a^2} \phi^2(x) \right) \tag{11.77}$$

und besitzt nur einen Kontinuumsliches wenn wir das Feld wie folgt reskalieren,

$$\phi(m) \longrightarrow \tilde{\phi}(x) = \frac{1}{a^{(d-2)/2}} \phi(am). \tag{11.78}$$

Dann strebt die Gitterwirkung gegen die Wirkung des Klein-Gordon Feldes,

$$S = \frac{1}{2} \int d^d x \left((\nabla \tilde{\phi}(x), \nabla \tilde{\phi}(x)) + m^2 \tilde{\phi}^2(x) \right) \quad \text{mit } m = m_L/a.$$

Die Reskalierung (11.78) ist in Einklang mit der Dimension eines Skalarfeldes im Kontinuum, $[\phi] = [\text{Länge}]^{-(d-2)/2}$, und sie überträgt sich auf eine Renormierung der n -Punktfunktion

$$G(m_1, \dots, m_n) \longrightarrow \tilde{G}(x_1, \dots, x_n) = a^{-n(d-2)/2} G(am_1, \dots, am_n). \tag{11.79}$$

- Für große Werte des Arguments fallen die 2-Punktfunktionen der Gittertheorie und der Kontinuumstheorie exponentiell ab,

$$G(n) \xrightarrow{m_L|n| \gg 1} e^{-m_L|n|} \quad , \quad \tilde{G}(x) \xrightarrow{m|x| \gg 1} e^{-m|x|}. \tag{11.80}$$

- Für große Werte des Arguments $|n| \gg 1/m_L$ wird $G(n)$ näherungsweise drehinvariant. Diese Eigenschaft ist notwendig für ein $SO(d)$ -invariante Korrelationsfunktion im Kontinuumslimes. Obwohl die Gitterregularisierung die Drehinvarianz bricht, wird diese im Kontinuumslimes wieder hergestellt.

Beim Kontinuumslimes treten vier Größen auf:

1. Die dimensionslose *nackte Masse* m_L in der Gitterwirkung (11.76).
2. Die dimensionslose *Korrelationslänge* auf dem Gitter ξ_L ergibt sich aus der 2-Punktfunktion,

$$\frac{1}{\xi_L} = - \lim_{|n| \rightarrow \infty} \frac{\log G(n)}{|n|}. \quad (11.81)$$

Im Allgemeinen ist ξ_L eine Funktion von m_L und eventuell weiteren nackter Kopplungskonstanten. Für das freie Skalarfeld ist $\xi_L = 1/m_L$.

3. Die *physikalische Masse* m des Teilchens, das durch das Feld ϕ beschrieben werden soll. Diese hat die Dimension einer Masse oder einer inversen Länge und der numerische Wert ist experimentell vorgegeben.
4. Durch Wahl der nackten Masse m_L ergibt sich die Korrelationslänge ξ_L in Gittereinheiten und diese soll die physikalische Masse beschreiben,

$$m = \frac{1}{\xi} = \frac{1}{a \xi_L(m_L)}, \quad (11.82)$$

womit der *Gitterabstand* a eingeführt wäre. Der Abstand a ist also eine Funktion der gegebenen physikalischen Masse m und des dimensionslosen Parameters m_L .

Wir können die Verhältnisse auch unter einem *anderen Gesichtspunkt* interpretieren. Dem Abstand zwischen zwei nächsten Nachbarn auf dem Gitter wird zunächst willkürlich ein physikalischer Abstand a zugeordnet. Außerdem soll ϕ ein Teilchen der Masse m beschreiben. Das dimensionslose Produkt am entspricht der inversen Compton-Wellenlänge des Teilchens in Einheiten der willkürlich gewählten Gitterkonstanten. Diese Zahl soll identisch zur (dimensionslosen) inversen Korrelationslänge ξ_L^{-1} des Feldes auf dem Gitter sein. Dadurch wird bei Vorgabe von a und m der nackte Parameter $m_L(\xi_L)$ festgelegt. Eine Änderung der (unbeobachtbaren) Gitterkonstanten a kann durch Änderung des (ebenfalls unbeobachtbaren) nackten Parameters m_L kompensiert werden, so dass die *physikalischen Größen unverändert bleiben*. Man sagt, die Physik sei konstant längs der Trajektorie $m_L(a)$.

Der Kontinuumsimes besteht also im Wesentlichen aus zwei Schritten:

Die freien Parameter der Gittertheorie (hier m_L) müssen so gewählt werden, dass die Korrelationslängen im Vergleich zum Gitterabstand sehr groß werden, also $\xi_L \gg 1$ oder $\xi \gg a$ gilt. Für das freie Klein-Gordon-Feld bedeutet dies, dass der Parameter m_L sehr klein gewählt werden muss, damit die 2-Punktfunktion im Vergleich zum Gitterabstand langreichweitig wird.

Für jeden freien Parameter muss eine Größe des Gittermodells an eine entsprechende Größe der Natur (z.B. physikalische Massen) angepasst werden. Durch diesen Schritt wird dem Gitterabstand eine physikalische Länge zugeordnet.

Will man beispielsweise Pionen mit $\lambda_c \approx 10^{-13}$ cm beschreiben, und hat man dem Gitter willkürlich die Gitterkonstante $a = 10^{-15}$ cm zugeordnet, dann ist $\lambda_c/a \approx 100$. Die Korrelationslänge ξ_L sollte also ebenfalls 100 betragen, d.h. für die freie Theorie ist die nackte Masse $m_L = 0.01$. In *MC-Simulationen* geht man meist umgekehrt vor: man gibt den Parameter m_L vor und bestimmt anschließend für die bekannte Masse m nach (11.82) die zugehörige Gitterkonstante. Damit einerseits Gitterartefakte und andererseits die Endlichkeit des Gitters die Resultate nicht verfälschen, sollte bei jeder Simulation die Ungleichungen

$$1 \ll \xi_L \ll N \tag{11.83}$$

erfüllt sein. Die Gitter müssen also genügend gross sein, damit die interessanten Größen darauf Platz haben. Zur Zeit kann man auf schnellen Computern Skalarfeldtheorien auf Gittern mit 32^4 Punkten simulieren.

11.5 Kontinuumsimes für Spinmodelle

In der Nähe eines kritischen Punktes eines allgemeineren klassischen d -dimensionalen Gittermodells divergiert die Korrelationslänge ξ_L . Dann kann das statistische Gittermodell als Gitterregularisierung einer Euklidischen Quantenfeldtheorie in d Dimensionen oder einer $d + 1$ -dimensionalen Quantenfeldtheorie bei endlichen Temperaturen interpretiert werden. Im zweiten Fall macht man den Grenzübergang

$$a \longrightarrow 0 \quad , \quad T = \frac{1}{aN_d} \text{ fest.} \tag{11.84}$$

In der Nähe eines kritischen Punktes ist die Korrelationslänge in Gittereinheiten

$$\frac{\xi}{a} = \xi_L = \kappa(\beta_c - \beta)^{-\nu}, \quad \beta \uparrow \beta_c. \tag{11.85}$$

Legen wir die Korrelationslänge ξ fest, dann fixiert (11.85) den Gitterabstand a als Funktion des Parameters β , also $a = a(\beta)$. Der Kontinuumsimes wird offensichtlich erreicht wenn β gegen β_c strebt und ξ festgehalten wird. Der Parameter β ist nicht mehr frei, da er den Gitterabstand fixiert. Dafür gewinnt man ξ als neuen Parameter der Quantenfeldtheorie. Wir sehen hier die sogenannte *dimensionale Umwandlung* (engl. *dimensional transmutation*) am Werk, bei der ein dimensionsloser Parameter gegen einen skalenabhängigen Parameter eingetauscht wird.

Wir wollen nun annehmen, dass eine gewisse Korrelationsfunktion

$$\langle O(n)O(m) \rangle \sim e^{-m_{OL}|n-m|} \quad (11.86)$$

mit entsprechendem Abschirmparameter m_{OL} in einer Simulation bestimmt worden ist. Da der Abstand $|n - m|$ nur in Einheiten des Gitterabstandes bekannt ist, ergibt die Simulation die Abschirmmasse in Einheiten von $a(\beta)$. Wegen der angenommenen Universalität sollte in der Nähe des kritischen Punktes

$$m_{Oa}(\beta) = m_{OL} = \kappa_O (\beta_c - \beta)^\nu, \quad \beta \uparrow \beta_c \quad (11.87)$$

gelten. Damit strebt das Produkt $m_O \xi$ gegen einen konstanten Wert in der Umgebung des kritischen Punktes,

$$m_O \xi = \kappa_m \kappa. \quad (11.88)$$

Die Zahlen κ und κ_m können in Simulationen bestimmt werden. Mit ihrer Hilfe kann die Abschirmmasse m_O in Einheiten des freien Parameters $1/\xi$ „gemessen“ werden.

11.6 Programm: Blockspintransformation

Das folgende Programm berechnet die Trajektorien der Blockspintransformation für das $2d$ -Isingmodells auf einem 4×4 Gitter. Der Blockkern $T(w', w)$ beruht auf der Mehrheitsregel (11.66). Die Hamiltonfunktion des geblockten Sytem hat die Form (11.67).

```

/* Programm rengroupis2d.c */
/* Berechnet analytisch Trajektorien */
/* der MC-RG Transformation. Geblockt */
/* wird mit der Mehrheitsregel */
#include <stdio.h>
#include <stdlib.h>
#include <math.h>
#include <string.h>
#include "constrenising2.h"
#include "stdrenising.h"

```

```

int main(void){
    conf=1<<V; /* Anzahl Konfigurationen */
    nachbarn();
    puts("K1="); scanf("%lf",&k1);
    puts("K2="); scanf("%lf",&k2);
    puts("K3="); scanf("%lf",&k3);
    puts("K4="); scanf("%lf",&k4);
    printf("(%.3f,%.3f)",k1,k2);
    for (ig=0;ig<10;ig++){
        c1=0;c2=0;c3=0;c4=0;
        for (i=0;i<conf;i++){
            /* Binaerdarstellung von i = Konfigurationen */
            for (p=0;p<V;p++){
                s[p]=(i>>p)%2;s[p]=2*s[p]-1;
            };
            h1=0;h2=0;h3=0;
            for (p=0;p<V;p++){
                h1=h1+s[p]*(s[nr[p]]+s[no[p]]);
                h2=h2+s[p]*(s[nro[p]]+s[nru[p]]);
                h3=h3+s[p]*s[nr[p]]*s[no[p]]*s[nro[p]];
            };
            /* printf("%f %f %f %f\n",k1,k2,k3,k4); */
            boltz=exp(k1*h1+k2*h2+k3*h3);
            blockspin(s);
            for (p=0;p<VB;p++){
                kc1[p]=bs[p]*k1[p];
                kc2[p]=bs[p]*k2[p];
                kc3[p]=bs[p]*k3[p];
                kc4[p]=bs[p]*k4[p];
            };
            if ((kc1[1]>=0)&&(kc1[2]>=0)&&(kc1[3]>=0)&&(kc1[4]>=0)){
                if (kc1[1]*kc1[2]*kc1[3]*kc1[4]==0) c1=c1+0.5*boltz;
                else c1=c1+boltz;}
            if ((kc2[1]>=0)&&(kc2[2]>=0)&&(kc2[3]>=0)&&(kc2[4]>=0)){
                if (kc2[1]*kc2[2]*kc2[3]*kc2[4]==0) c2=c2+0.5*boltz;
                else c2=c2+boltz;}
            if ((kc3[1]>=0)&&(kc3[2]>=0)&&(kc3[3]>=0)&&(kc3[4]>=0)){
                if (kc3[1]*kc3[2]*kc3[3]*kc3[4]==0) c3=c3+0.5*boltz;
                else c3=c3+boltz;}
            if ((kc4[1]>=0)&&(kc4[2]>=0)&&(kc4[3]>=0)&&(kc4[4]>=0)){
                if (kc4[1]*kc4[2]*kc4[3]*kc4[4]==0) c4=c4+0.5*boltz;
                else c4=c4+boltz;}
        };
        l1=log(c1);l2=log(c2);l3=log(c3);l4=log(c4);
        k1=(l1-l4)/16;
        k2=(l1-2*l3+l4)/32;
        k3=(l1-4*l2+2*l3+l4)/32;
        k4=(l1+4*l2+2*l3+l4)/32;
        printf("(%.3f,%.3f)",k1,k2);
    };
    printf("\n");
    return 0;
}

```

In der folgenden Headerdatei `constrenising2.h` werden die Konstanten und Variablen definiert. Die Array $Kl1[VB], \dots$ sind Repräsentanten der 4 Klassen von Konfigurationen auf dem geblockten Gitter.

```

/* Headerdatei constrenising2.h */
#define N 4 /* Gitterlaenge */
#define V (N*N) /* Anzahl Gitterpunkte */
#define VB (V/4) /* Anzahl Gitterpunkt des gebt. Gitters */
short x, y, xm, xp, ym, yp;
short s[V], nr[V], no[V], nro[V], nru[V];
short bs[VB], kc1[VB], kc2[VB], kc3[VB], kc4[VB];
short k11[VB]={1,1,1,1}, k12[VB]={1,1,-1,1};
short k13[VB]={-1,-1,1,1}, k14[VB]={-1,1,1,-1};
unsigned int ig, i, il, j, jl, conf;
unsigned short p, q;
double k1, k2, k3, k4, c1, c2, c3, c4, l1, l2, l3, l4, boltz;
int h1, h2, h3;
FILE *fp;

```

In der folgenden Headerdatei `stdrenising.h` werden die nächsten und übernächsten Nachbarn eines Gitterpunktes berechnet, sowie die zu einer Spinkonfiguration $s[V]$ gehörende Blockspinkonfiguration $bs[VB]$.

```

/* Headerdatei stdrenising.h */
/* Bereitstellung der naechsten Nachbarn */
void nachbarn(void)
{
    for (il=0; il<V; il++){
        y=il/N;
        x=il-y*N;
        xp=x+1, yp=y+1, ym=y-1;
        nr[il]=y*N+xp*N;
        no[il]=(yp*N)*N+x;
        nro[il]=(yp*N)*N+xp*N;
        nru[il]=((ym+N)%N)*N+xp*N;
    }
}
void blockspin(short *s)
{
    for (il=0; il<VB; il++){
        p=(2*il)/N; jl=p*N+2*il;
        bs[il]=s[jl]+s[jl+1]+s[jl+N]+s[jl+N+1];
    }
}

```

Kapitel 12

Reine Gittereichtheorien

Nach dem heutigen Kenntnisstand werden *alle* fundamentalen Wechselwirkungen durch Eichtheorien beschrieben. Die bekannteste Eichtheorie ist die Elektrodynamik. Sie ist eine Theorie mit Abelscher Symmetriegruppe. Die schwache und starke Wechselwirkung werden jeweils durch eine nicht-Abelsche Eichtheorie modelliert. In einem gewissen Sinne ist auch die allgemeine Relativitätstheorie eine nicht-Abelsche Eichtheorie.

Die erste Formulierung einer Eichtheorie auf dem Gitter geht auf FRANZ WEGNER zurück [10]. Er untersuchte Ising-artige Theorien mit einer *lokalen* \mathbb{Z}_2 -Invarianz und führte dabei den Ordnungsparameter ein, der in verallgemeinerter Form heute als Wilson-Schleife bekannt ist. Bei unserer Diskussion der Dualitätstransformationen haben wir die 3-dimensionale \mathbb{Z}_2 -Eichtheorie bereits kennengelernt. Sie ist dual zum 3-dimensionalen Ising-Modell. Drei Jahre nach Wegners Arbeit formulierte WILSON erstmalig nicht-Abelsche Eichtheorien auf dem Gitter. Er fand ein neues Kriterium für Confinement in reinen Eichtheorien: das Flächengesetz für Wilson-Schleifen [11]. Es folgten Monte-Carlo-Simulationen von reinen Gitter-Eichtheorien in 3 und 4 Dimensionen, zunächst mit Eichgruppe \mathbb{Z}_2 und später mit $SU(2)$ sowie $SU(3)$, durch CREUTZ, JACOBS und REBBI [12].

Im Folgenden werden wir nach einer kurzen Erinnerung an die Eichtheorien im Kontinuum die wichtigsten (qualitativen) Eigenschaften von Gittereichtheorien besprechen.

12.1 Eichtheorien im Kontinuum

Um das erfolgreiche Eichprinzip zu illustrieren, betrachten wir eine komplexes, ein-komponentiges Skalarfeld mit klassischer Lagrangedichte

$$\mathcal{L} = \partial_\mu \phi^\dagger \partial^\mu \phi - (mc/\hbar)^2 \phi^\dagger \phi, \quad (12.1)$$

und Bewegungsgleichung

$$\left(\square + \frac{m^2 c^2}{\hbar^2} \right) \phi = 0. \quad (12.2)$$

Wie in der Hochenergiephysik üblich, werden wir natürliche Einheiten mit $\hbar = c = 1$ benutzen. Im Gegensatz zu einem reellen einkomponentigen Feld beschreibt ein komplexes Feld elektrisch geladene Teilchen. Die globalen, d.h. orts- und zeitunabhängigen Phasentransformationen

$$\phi(x) \longrightarrow \phi'(x) = \Omega \phi(x), \quad \Omega = e^{ie\lambda} \in U(1). \quad (12.3)$$

führen Lösungen in Lösungen über. Es sind Symmetrien der Lagrangedichte für das geladene Klein-Gordon-Feld. Die Dichte ist aber nicht invariant unter lokalen, d.h. orts- und zeitabhängigen Phasentransformationen,

$$\phi(x) \longrightarrow \phi'(x) = \Omega(x) \phi(x), \quad \Omega(x) = e^{ie\lambda(x)} \in U(1), \quad (12.4)$$

da die Ableitungen in (12.1) und (12.2) auch auf die Funktion $\Omega(x)$ wirken. Die Phasenänderung hinter dem Mond muss also genau gleich sein wie diejenige in Jena.

Es zeigt sich nun, dass eine globale Symmetrie durchaus zu einer lokalen Symmetrie erweitert werden kann, wenn man das geladene Feld an ein Eichpotential A_μ koppelt. In der Schrödinger, Dirac oder Klein-Gordon-Theorie bedeutet dies, dass die partielle Ableitung nach x^μ durch die *kovariante Ableitung*

$$D_\mu(A) = \partial_\mu - ieA_\mu \quad (12.5)$$

ersetzt wird. Im Gegensatz zu $\partial_\mu \phi$ soll $D_\mu(A)\phi$ genauso transformieren wie ϕ ,

$$D_\mu(A')\phi'(x) = \Omega(x) D_\mu(A)\phi(x) \quad \text{bzw.} \quad D_\mu(A') = \Omega D_\mu(A) \Omega^{-1}, \quad (12.6)$$

und diese Forderung impliziert folgende Transformation des Potentials

$$A'_\mu = \Omega A_\mu \Omega^{-1} - \frac{i}{e} \partial_\mu \Omega \Omega^{-1} = \Omega \left(A_\mu + \frac{i}{e} \partial_\mu \right) \Omega^{-1} \stackrel{(12.3)}{=} A_\mu + \partial_\mu \lambda. \quad (12.7)$$

Aus dem *Eichpotential* A_μ berechnet sich der (eich)invariante und antisymmetrische *Feldstärketensor*,

$$F_{\mu\nu}(A) = \frac{i}{e}[D_\mu(A), D_\nu(A)] = \partial_\mu A_\nu - \partial_\nu A_\mu = F_{\mu\nu}(A'), \quad (12.8)$$

dessen Quadrat in die *eichinvariante* Lagrangedichte für das System aus wechselwirkenden Photonen- und geladenen Spin-0 Teilchen eingeht,

$$\mathcal{L}(\phi, A_\mu) = -\frac{1}{4}F_{\mu\nu}F^{\mu\nu} + (D_\mu\phi)^\dagger D^\mu\phi - m^2\phi^\dagger\phi = \mathcal{L}(\phi', A'_\mu). \quad (12.9)$$

Wir wiederholen nun diese sogenannte *minimale Kopplung* an ein Eichpotential für ein mehr-komponentiges Skalarfeld mit Werten in einem Vektorraum V mit Skalarprodukt. Nach Wahl einer Basis hat ϕ die Komponentendarstellung

$$\phi = \begin{pmatrix} \phi_1 \\ \phi_2 \\ \vdots \\ \phi_n \end{pmatrix}, \quad \phi^\dagger = (\bar{\phi}_1, \bar{\phi}_2, \dots, \bar{\phi}_n). \quad (12.10)$$

Die reelle Langrangefunktion für das freie Feld ist die Verallgemeinerung von (12.1) auf V -wertige Felder,

$$\mathcal{L} = (\partial_\mu\phi, \partial^\mu\phi) - m^2(\phi, \phi), \quad (12.11)$$

wobei (\cdot, \cdot) das Skalarprodukt in V bezeichnet. Jede Komponente von $\phi(x)$ erfüllt dann die Klein-Gordon-Gleichung (12.2).

Das Feld transformiere nach einer irreduziblen Darstellung R einer noch nicht weiter spezifizierten halbeinfachen kompakten Gruppe \mathcal{G} ,

$$\phi(x) \longrightarrow R(\Omega)\phi(x), \quad \Omega \in \mathcal{G}. \quad (12.12)$$

Ohne Beschränkung der Allgemeinheit dürfen wir annehmen, dass die linearen Abbildungen $R(\Omega)$ unitär sind und das Skalarprodukt auf V invariant lassen, $(R\phi, R\chi) = (\phi, \chi)$. Im *Weinberg-Salam-Modell* der elektroschwachen Wechselwirkung ist ϕ ein komplexes Dublett in der fundamentalen Darstellung der Eichgruppe $SU(2)$.

Wir wollen nun eine neue Lagrange-Funktion konstruieren, die unter lokalen Eichtransformationen

$$\phi(x) \longrightarrow \phi'(x) = R(\Omega(x))\phi(x) \quad (12.13)$$

invariant ist. Dies gelingt wiederum durch *minimale Kopplung* des Multipletts ϕ an ein Eichpotential, d.h. durch die Ersetzung von gewöhnlichen durch kovariante Ableitungen. Für ein Skalarfeld in der definierenden Darstellung lautet die Ersetzung

$$\partial_\mu \longrightarrow D_\mu \phi = \partial_\mu \phi - ieA_\mu \phi, \quad (12.14)$$

wobei e die Stärke der Kopplung parametrisiert. Für ein n -komponentiges Feld ϕ wird das Vektorpotential A_μ eine $n \times n$ Matrix sein. Die Forderung (12.6) impliziert das folgende Transformationsverhalten für das Eichpotential.

$$A_\mu \longrightarrow A'_\mu = \Omega A_\mu \Omega^{-1} - \frac{i}{e} \partial_\mu \Omega \Omega^{-1}. \quad (12.15)$$

Für nicht-Abelsche Gruppen werden A_μ und Ω nicht vertauschen, und wir können diese Formel für die Eichtransformationen des Eichpotentials nicht weiter vereinfachen. Wir sehen aber, dass A_μ in der Lie-Algebra \mathfrak{g} von \mathcal{G} liegen sollte. Dann liegen beide Terme auf der rechten Seite von (12.15) in dieser Algebra und Eichtransformationen wirken im Raum der \mathfrak{g} -wertigen Eichpotentiale. Die \mathfrak{g} -wertige *Feldstärke*

$$F_{\mu\nu} = \frac{i}{e} [D_\mu, D_\nu] = \partial_\mu A_\nu - \partial_\nu A_\mu - ie[A_\mu, A_\nu] \quad (12.16)$$

ist nicht mehr eichinvariant,

$$F_{\mu\nu}(x) \longrightarrow \Omega(x) F_{\mu\nu}(x) \Omega^{-1}(x). \quad (12.17)$$

Sie transformiert nach der adjungierten Darstellung der Eichgruppe \mathcal{G} .

Für Skalarfelder, die nach einer beliebigen irreduziblen Darstellung transformieren, $\phi' = R(\Omega)\phi$, ist die Kovarianzbedingung (12.6) automatisch erfüllt, wenn wir als kovariante Ableitung

$$D_\mu \phi = \partial_\mu \phi - ieR_*(A_\mu)\phi \quad (12.18)$$

wählen. Hier ist R_* die von der Darstellung R induzierte Darstellung der Lie-Algebrawertigen \mathfrak{g} . Der Kommutator von kovarianten Ableitungen in der Darstellung R ist dann

$$[D_\mu, D_\nu] = \frac{e}{i} R_*(F_{\mu\nu}). \quad (12.19)$$

Gerade in neueren Arbeiten über reine Eichtheorien spielt die Frage der Abhängigkeit der Erwartungswerte von der Darstellung der Eichgruppe eine wichtige Rolle.

Zum Beispiel könnte man fragen, ob die reine $SO(3)$ -Eichtheorie die gleiche Phasenstruktur aufweist wie die $SU(2)$ -Eichtheorie [78].

Wie man leicht einsieht, ändert sich der Term

$$\text{tr } F^{\mu\nu} F_{\mu\nu} \tag{12.20}$$

nicht bei einer Eichtransformation (12.15,12.17), da die Spur unter zyklischer Vertauschung der Argumente nicht ändert. Dieser eichinvariante Term ist der wichtige *Yang-Mills* Term. In Anlehnung an die Maxwell-Theorie wählt man als eichinvariante Lagrangedichte für das wechselwirkende System A, ϕ

$$\mathcal{L} = -\frac{1}{4} \text{tr } F^{\mu\nu} F_{\mu\nu} + (D_\mu \phi, D^\mu \phi) - m^2(\phi, \phi). \tag{12.21}$$

Nach Konstruktion ist sie invariant unter den lokalen Eichtransformationen

$$\begin{aligned} \phi(x) &\longrightarrow \phi'(x) = \Omega(x)\phi(x) \\ A_\mu(x) &\longrightarrow A'_\mu(x) = \Omega(x)A_\mu(x)\Omega^{-1}(x) - \frac{i}{e} \partial_\mu \Omega(x) \Omega^{-1}(x). \end{aligned} \tag{12.22}$$

Wir fassen zusammen. Eine Eichtheorie ist bestimmt durch:

- Angabe der Eichgruppe \mathcal{G} . Für die Quantenchromodynamik, ist $\mathcal{G} = SU(3)$ und für die elektroschwache Theorie $\mathcal{G} = SU_L(2) \times U_Y(1)$.
- Festlegung der Darstellungen, nach denen die Materiefelder ϕ transformieren.
- Als Parameter enthalten Eichtheorien eine *universelle* Kopplungskonstante e . Daneben sind noch die Massen und eventuell Selbstkopplungen anzugeben. Die Weinberg-Salam Theorie enthält allerdings noch weitere Parameter: die Elemente der KMS-Matrix und die Yukawa Kopplungskonstanten.

12.1.1 Paralleltransport

Ein Skalarfeld ist kovariant konstant, wenn

$$D_\mu \phi = 0 \quad \text{bzw.} \quad \partial_\mu \phi = ieR_*(A_\mu)\phi \tag{12.23}$$

gilt. Die Integrabilitätsbedingung für die Existenz einer (lokal) eindeutigen Lösung führt in diesem Fall auf

$$0 = [D_\mu, D_\nu]\phi \stackrel{(12.19)}{=} ieR_*(F_{\mu\nu})\phi.$$

Nur für verschwindende Feldstärke können wir (zumindest lokal) die d Gleichungen (12.23) simultan lösen.

Die Lösung der Gleichung kovarianter Konstanz *entlang eines Weges* \mathcal{C} von x nach y ist nicht ganz einfach, da die Eichpotentiale zu verschiedenen Raumzeit-Punkten nicht kommutieren müssen. Wir parametrisieren den Weg mit $x(s)$, wobei

$$x(0) = x \quad \text{und} \quad x(1) = y$$

gelten soll. Die kovariante Ableitung von ϕ längs \mathcal{C} soll verschwinden,

$$\dot{x}^\mu D_\mu \phi = \frac{d\phi(s)}{ds} - ie A_\mu(x(s)) \dot{x}^\mu(s) \phi(s) = 0. \quad (12.24)$$

Wir haben $\phi(x(s)) = \phi(s)$ geschrieben und $R(\Omega) = \Omega$ angenommen. Interpretieren wir den Kurvenparameter s als Zeit dann ist dies gerade die zeitabhängige Schrödinger-Gleichung mit 'Hamilton-Operator' $\sim A_\mu(x(s)) \dot{x}^\mu(s)$. Deshalb ist die Lösung dieser gewöhnlichen Differentialgleichung

$$\phi(s) = \mathcal{P} \exp \left(ie \int_0^s du A_\mu(x(u)) \dot{x}^\mu(u) \right) \phi(x), \quad (12.25)$$

wobei \mathcal{P} die 'Zeitordnung' bedeutet, im vorliegenden Fall nennt man es die *Pfadordnung*, da wir bezüglich dem Kurvenparameter ordnen. Für nicht-Abelsche Eichfelder kommutieren die g -wertigen 'Hamilton-Operatoren' zu verschiedenen Kurvenparameter nicht mehr und deshalb ist die Pfadordnung in (12.25) notwendig. Für Abelsche Felder entfällt dagegen die Pfadordnung \mathcal{P} . Setzen wir nun $s = 1$, dann erhalten wir für den Paralleltransport

$$\phi(y) = U(\mathcal{C}; A) \phi(x), \quad U(\mathcal{C}; A) = \mathcal{P} \exp \left(ie \int_0^1 ds A_\mu \dot{x}^\mu \right). \quad (12.26)$$

Die vier Komponenten des Eichpotentials definieren eine 1-Form, $A = A_\mu dx^\mu$, und das Linienintegral im Exponenten von (12.26) ist gerade das Integral dieser 1-Form längs des Weges \mathcal{C} . Deshalb schreibt man auch kurz

$$U(\mathcal{C}, A) = \mathcal{P} \exp \left(ie \int_{\mathcal{C}} A \right). \quad (12.27)$$

Paralleltransporter haben folgende Eigenschaften:

- Ist \mathcal{C} ein Weg von x nach y und \mathcal{C}' ein anschließender Weg von y nach z , dann verbindet der zusammengesetzte Weg $\mathcal{C}' \circ \mathcal{C}$ (zuerst \mathcal{C} und anschließend \mathcal{C}') den

Punkt x mit z und es gilt die *Kompositionsregel*

$$U(\mathcal{C}' \circ \mathcal{C}; A) = U(\mathcal{C}'; A)U(\mathcal{C}; A). \quad (12.28)$$

- Der Paralleltransporter hängt vom Weg ab, entlang dem transportiert wird. Sind \mathcal{C}' und \mathcal{C}'' beides Wege von x nach y , dann ist $\mathcal{C} = \mathcal{C}'^{-1} \circ \mathcal{C}''$ eine Schleife von x nach x . Für eine Abelsche Theorie ist nach dem Satz von Stokes

$$U(\mathcal{C}; A) = \exp \left(ie \oint_{\mathcal{C}=\partial\mathcal{G}} A \right) = \exp \left(ie \int_{\mathcal{G}} F \right). \quad (12.29)$$

Darin ist \mathcal{G} das von \mathcal{C} eingeschlossene Gebiet und F die 2-Form der Feldstärke,

$$F = \frac{1}{2} F_{\mu\nu} dx^\mu dx^\nu = dA. \quad (12.30)$$

Leider gibt es keine ähnlich einfache Formel für nicht-Abelsche Eichtheorien. Zwar existiert ein nicht-Abelsches Stokes-Theorem in der mathematischen Literatur [79], aber es scheint keine interessante Anwendung für dieses komplizierte Theorem in der Physik zu geben. Es impliziert aber, dass für $F = 0$ der Paralleltransport wegunabhängig ist, solange die Wege ineinander deformierbar sind.

- Der Paralleltransport mit dem eichtransformierten Feld A' in (12.15) steht in einfacher Beziehung zu demjenigen mit A . Ist \mathcal{C}_{yx} ein Weg von x nach y , so gilt

$$U(\mathcal{C}_{yx}; A') = \Omega(y) U(\mathcal{C}_{yx}; A) \Omega^{-1}(x). \quad (12.31)$$

Für jede Schleife ist deshalb die Variable

$$\text{tr } U(\mathcal{C}, A) \quad (12.32)$$

eichinvariant, $\text{tr } U(\mathcal{C}, A') = \text{tr } U(\mathcal{C}, A)$. Diese eichinvarianten Größen heißen *Wilson-Schleifen*. Für reine Eichtheorien bildet die Menge der Wilson-Schleifen ein vollständiges System von eichinvarianten Funktionen auf dem Konfigurationsraum.

Wir beweisen nun, dass beide Seiten in (12.31) zur gleichen Parallelverschiebung führen und damit gleich sind. Es sei wieder $x(s)$ eine Parametrisierung des Weges \mathcal{C}_{yx} von x nach y . Die Verschiebung mit $\Omega(y)U(\mathcal{C}_{yx}; A)\Omega^{-1}(x)$ ist gegeben

durch

$$\phi'(x(s)) = \Omega(x(s)) \exp\left(ie \int_0^s A_\mu \dot{x}^\mu\right) \Omega^{-1}(x) \phi(x). \quad (12.33)$$

Die Ableitung nach dem Kurvenparameter führt auf die Schrödingergleichung

$$\begin{aligned} \frac{d\phi'(s)}{ds} &= (\partial_\mu \Omega(s) \Omega^{-1}(s) + ie \Omega(s) A_\mu(s) \Omega^{-1}(s)) \dot{x}^\mu \phi'(s) \\ &= ie A'_\mu(s) \dot{x}^\mu(s) \phi'(s) \end{aligned}$$

mit der eindeutigen Lösung

$$\phi'(x(s)) = \mathcal{P} \exp\left(ie \int_0^s ds A'_\mu \dot{x}^\mu\right) \phi(x). \quad (12.34)$$

Vergleichen wir (12.33) mit (12.34) für $s = 1$, dann folgt die Beziehung (12.31).

- Es sei nun $\phi(x)$ ein Materiefeld, das unter einer Eichtransformation in $\Omega(x)\phi(x)$ übergeht. Dann ist der bilineare Ausdruck

$$\phi^\dagger(y) U(\mathcal{C}_{yx}; A) \phi(x) \quad (12.35)$$

eichinvariant. Aber für $F_{\mu\nu} \neq 0$ hängt er vom gewählten Weg $x \rightarrow y$ ab.

Im folgenden werden wir ausnahmslos die *Euklidische Version* von Eichtheorien untersuchen. Den formalen Übergang von der Lorentz- zur Euklidischen Signatur haben wir bereits besprochen. Im vorliegenden Fall führt die Wickrotation auf folgende Lagrangedichte für eine Euklidische Eichtheorie mit einem geladenen Skalarfeld,

$$\mathcal{L}_E = \frac{1}{4} \text{tr} F^{\mu\nu} F_{\mu\nu} + (D_\mu \phi, D^\mu \phi) + m^2(\phi, \phi), \quad (12.36)$$

wobei der Zusammenhang zwischen Eichpotential und Feldstärke und die Definition der kovarianten Ableitung nicht ändern. Natürlich werden in einer Euklidischen Feldtheorie die Indizes mit der Euklidischen Metrik $\delta_{\mu\nu}$ hoch- und runtergezogen. Zum Beispiel gelten $F_{\mu\nu} = F^{\mu\nu}$ und $F^{\mu\nu} F_{\mu\nu} = \sum F_{\mu\nu}^2$.

12.2 Das Gitterfeld

Es sei nun $\phi(x)$ ein Skalarfeld auf dem Gitter Λ mit einer Lagrangedichte, die invariant unter *globalen* Eichtransformationen $\phi(x) \rightarrow \Omega\phi(x)$ ist. Dann sind es die global

invarianten nächste-Nachbarn Terme

$$(\phi(x + e_\mu), \phi(x)), \quad (12.37)$$

wie sie in Gitterableitungen auftreten, die nicht invariant unter *lokalen Eichtransformationen*

$$\phi(x) \longrightarrow \phi'(x) = \Omega(x)\phi(x), \quad \Omega(x) \in \mathcal{G}, \quad (12.38)$$

auf dem Gitter sind. Im Skalarprodukt trifft das Feldes bei x das Feld am benachbarten Gitterpunkt $x + e_\mu$. Dies legt nahe, das Feld „parallel zu verschieben“, bevor das Skalarprodukt gebildet wird. Wir ersetzen also den Ausdruck (12.37) durch

$$(\phi(x + e_\mu), U_\mu(x)\phi(x)), \quad \text{wobei} \quad U_\mu(x) = U(x + e_\mu, x) \quad (12.39)$$

der *Paralleltransporter* von x nach $x + e_\mu$ ist. Dieser Ausdruck ist invariant unter lokalen Transformationen (12.38) des Materiefeldes wenn die Transporter unter lokalen Eichtransformationen wie der Paralleltransporter der Kontinuumstheorie transformiert,

$$U_\mu(x) \longrightarrow U'_\mu(x) = \Omega(x + e_\mu)U_\mu(x)\Omega^{-1}(x). \quad (12.40)$$

Im Allgemeinen hängt der Paralleltransport von Anfangspunkt, Endpunkt und dem gewählten Weg ab. Auf dem Gitter kann man sich unter $U_\mu(x)$ den Paralleltransport entlang der Gitterkante vorstellen, obwohl diese Interpretation bedeutungslos ist.

Diese Überlegungen legen nahe, als dynamische Variablen nicht etwa Eichpotentiale $A_\mu(x)$ in der Lie-Algebra, sondern die elementaren Paralleltransporter zwischen benachbarten Gitterpunkten zu wählen. Die Felder $\{U_\mu(x)\}$ nennt man *kompakte Variablen*, da alle relevanten (und wahrscheinlich konsistenten) Eichgruppen kompakt sind.

12.2.1 Wilsonsche Wirkung für Eichtheorien

Die gerichtete Gitterkante von x nach $x \pm e_\mu$ wird kurz mit $(x, \pm\mu)$ bezeichnet. Die dynamischen Variablen sind Elemente einer kompakten Gruppe \mathcal{G} und „leben“ auf den Gitterkanten. Eine Gitterkonfiguration U ist eine Abbildung von der Menge der (gerichteten) Kanten E in \mathcal{G} :

$$U : E = \{(x, \mu)\} \longrightarrow \mathcal{G} \quad (12.41)$$

Der Paralleltransporter $U(\mathcal{C})$ längs eines beliebigen Weges \mathcal{C} auf dem Gitter ist das geordnete Produkt der zu den Kanten des Weges gehörenden elementaren Transporter,

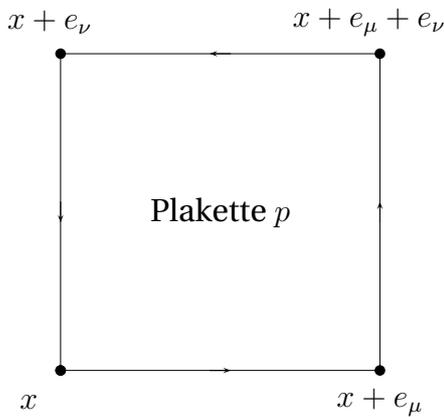
$$U(\mathcal{C}_{yx}) = U_{\mu_n}(y - e_{\mu_n}) \cdots U_{\mu_3}(x + e_{\mu_1} + e_{\mu_2}) U_{\mu_2}(x + e_{\mu_1}) U_{\mu_1}(x).$$

Wie im Kontinuum fordern wir

$$U^{-1}(\mathcal{C}) = U(\mathcal{C}^{-1}) \quad \text{z.B.} \quad U_{\mu}^{-1}(x) = U(x, x + e_{\mu}) \equiv U_{-\mu}(x + e_{\mu}). \quad (12.42)$$

In einer Yang-Mills-Theorie ist die Wirkung durch das Quadrat der Feldstärke oder *Krümmung* gegeben. Diese gibt an, um wieviel ein Feld sich (pro Flächeninhalt) verändert, wenn man es infinitesimal um einen geschlossenen Weg parallel-verschiebt. Auf dem Gitter gibt es keine infinitesimale Verschiebung. Die elementarste Verschiebung entlang eines geschlossenen Weges ergibt sich aus dem Produkt der Transporter längs des Randes einer elementaren Plakette. Es bezeichne (μ, ν) die durch e_{μ} und e_{ν} aufgespannte Ebene. Wir definieren

$$\begin{aligned} U_{\mu\nu}(x) &\equiv U_{-\nu}(x + e_{\nu}) U_{-\mu}(x + e_{\mu} + e_{\nu}) U_{\nu}(x + e_{\mu}) U_{\mu}(x) \\ &= U_{\nu}^{-1}(x) U_{\mu}^{-1}(x + e_{\nu}) U_{\nu}(x + e_{\mu}) U_{\mu}(x). \end{aligned} \quad (12.43)$$



wobei wir von (12.42) Gebrauch machten. Das Gruppenelement $U_p \equiv U_{\mu\nu}(x)$ bezeichnet also den Paralleltransporter um eine elementare Plakette p , definiert durch die vier Eckpunkte $x, x + e_{\mu}, x + e_{\mu} + e_{\nu}, x + e_{\nu}$. Man schreibt oft etwas kürzer

$$U_p = \prod_{\ell \in \partial p} U_{\ell}. \quad (12.44)$$

Die Abhängigkeit von x ist bei dieser Notation aber nicht mehr erkennbar. Unter einer

Eichtransformation transformiert die Plakettenvariable gemäß

$$U_{\mu\nu}(x) \longrightarrow \Omega(x) U_{\mu\nu}(x) \Omega^{-1}(x). \quad (12.45)$$

Um die folgende, auf Wilson zurückgehende Wahl für eine eichinvariante und reelle Wirkung zu motivieren, führen wir formal einen Gitterabstand a ein und schreiben

$$U_{\mu}(x) = e^{ieaA_{\mu}(x)} \quad (12.46)$$

mit dem interpolierenden Feld $A_\mu(x) = A_\mu^a(x)T_a$ mit Werten in der Lie Algebra. Bilden wir das Produkt der Gruppenelemente um eine elementare Plakette, so erhalten wir

$$\begin{aligned} U_p = U_{\mu\nu}(x) &= e^{-ieaA_\nu(x)} e^{-ieaA_\mu(x+ae_\nu)} e^{ieaA_\nu(x+ae_\mu)} e^{ieaA_\mu(x)} \\ &= e^{-ieaA_\nu(x)} e^{-ieaA_\mu(x)-iea^2\partial_\nu A_\mu(x)+O(a^3)} \\ &\quad e^{ieaA_\nu(x)+iea^2\partial_\mu A_\nu(x)+O(a^3)} e^{ieaA_\mu(x)} \end{aligned} \quad (12.47)$$

$$\begin{aligned} &= e^{iea^2(\partial_\mu A_\nu(x)-\partial_\nu A_\mu(x)-ie[A_\mu(x),A_\nu(x)])+O(a^3)} \\ &= e^{iea^2 F_{\mu\nu}(x)+O(a^3)}, \end{aligned} \quad (12.48)$$

wobei wir im Schritt von (12.47) zu (12.48) von der *Baker-Hausdorff-Formel*

$$e^A e^B = e^{A+B+\frac{1}{2}[A,B]+\dots} \quad (12.49)$$

Gebrauch machten und im Exponenten Terme bis zur Ordnung a^2 berücksichtigten. Es folgt

$$U_{\mu\nu}(x) + U_{\mu\nu}^\dagger(x) \approx 2 \cdot \mathbb{1} - e^2 a^4 F_{\mu\nu}^2(x) + O(a^5). \quad (12.50)$$

Da der führende Term nach der konstanten Matrix von der Ordnung a^4 ist, könnte man meinen, dass wir von Beginn an die Entwicklung bis zu dieser Ordnung hätten ausführen müssen. Für die unitäre Matrix $U = \exp(iT)$ mit hermitescher Matrix $T = ea^2 F_{\mu\nu} + O(a^3)$ gilt jedoch

$$U + U^\dagger = 2 - T^2 + O(T^4).$$

Zur Ordnung a^4 in $U + U^\dagger$ trägt also tatsächlich nur der führende Term der Ordnung a^2 in T bei. Das Ergebnis dieses *naiven Kontinuumslikes* legt folgende Definition für die Wirkung einer Euklidischen Eichtheorie nahe:

$$S_{\text{eich}} = \frac{1}{e^2 N} \sum_p \text{tr} \left\{ \mathbb{1} - \frac{1}{2} (U_p + U_p^\dagger) \right\} \quad (\text{Wilson}). \quad (12.51)$$

Die Summe erstreckt sich über alle Plaketten im Gitter, d.h. wir erhalten eine Summe über alle Gitterpunkte x (im Kontinuumslikes wird diese Summe zur Raumzeit-Integration) sowie über alle Flächenelemente μ, ν . Der Normierungsfaktor $1/N$ berücksichtigt, dass die Variablen U_ℓ zu einer N -dimensionalen Darstellung der Eichgruppe gehören. Sind alle $U_p = \mathbb{1}$, dann verschwindet die Eichwirkung. Für allen anderen Konfigurationen ist S_{eich} positiv. Für $SU(2)$ ist $\text{tr} U$ reell und in der funda-

mentalen Darstellung wird

$$S_{\text{eich}} = \frac{1}{2e^2} \sum_p \text{tr} (\mathbb{1} - U_p) \quad \text{für SU}(2). \quad (12.52)$$

Bei der numerischen Berechnung von gewöhnlichen Integralen kann man zum Beispiel die Rechteckregel mit einem Fehler der Ordnung $O(a)$ oder die Trapezregel mit einem Fehler $O(a^2)$ oder noch besser die Simpson-Regel mit einem Fehler $O(a^4)$ benutzen, siehe Kapitel 3. Für die meisten Integranden liefert das Simpson-Verfahren auf groben Gittern wesentlich genauere Resultate als die Rechteckregel. Die Gitterwirkung von Wilson approximiert die Yang-Mills-Wirkung bis auf Fehler der Ordnung $O(a^2)$. Nun ist es naheliegend, hier ebenfalls genauere Diskretisierungen zu finden. Mehrere Methoden wurden verfolgt, um zu *verbesserten Gitterwirkungen* zu gelangen. Die bekanntesten sind die von K. Wilson vorgeschlagene und auf der Renormierungsgruppe beruhende Verbesserungsmethode [80] und die von K. Symanzik initiierte auf der Störungstheorie beruhende Methode [81].

12.3 Invariantes Maß und irreduzible Darstellungen

Zur Berechnung der Zustandssumme oder von Erwartungswerten benötigen wir eine Integration über die dynamischen Freiheitsgrade. In der Kontinuumstheorie sind dies die Eichpotentiale $A_\mu(x)$ (siehe die Lehrbücher über Eichtheorien oder meine Vorlesung *Path Integrals*). Auf dem Gitter werden die Eichpotentiale durch die Paralleltransporter $U_\mu(x) \in \mathcal{G}$ entlang der elementaren Kanten ersetzt. Deshalb ist es naheliegend, die formale Integration über alle Eichpotentiale durch die *invariante Integration* über die Eichgruppe \mathcal{G} zu ersetzen,

$$\int \mathcal{D}A_\mu(x) \longrightarrow \int \prod_{(x,\mu)} dU_\mu(x). \quad (12.53)$$

Hier ist dU das bis auf eine multiplikative Konstante eindeutige positive sowie links- und rechts-invariante *Haar-Maß* auf der kompakten Eichgruppe,

$$dU = d(\Omega U) = d(U \Omega), \quad \Omega \in \mathcal{G}. \quad (12.54)$$

Wir normieren das invariante Maß auf Eins, $\int dU = 1$. Jede kompakte Gruppe besitzt ein derartiges Haar-Maß. Die Bedingungen (12.54) sind gleichbedeutend mit der

Links- und Rechtsinvarianz der *Mittelbildung*,

$$\mathcal{M}(f) \equiv \int_{\mathcal{G}} dU f(U) = \int_{\mathcal{G}} dU f(\Omega U) = \int_{\mathcal{G}} dU f(U\Omega) \quad (12.55)$$

für alle Gruppenelemente Ω und Funktionen $f : \mathcal{G} \rightarrow \mathbb{C}$. Für eine *endliche Gruppe* ist die Mittelbildung gleich dem Mittelwert von f ,

$$\mathcal{M}(f) = \frac{1}{|\mathcal{G}|} \sum_{U \in \mathcal{G}} f(U). \quad (12.56)$$

Die Mittelbildung \mathcal{M} trägt ihren Namen zurecht: sie ist linear, positiv, normiert und invariant. Für endliche Gruppen mit Mittelbildung (12.56) ist die Invarianzeigenschaft (12.55) evident.

Die Elemente der Abelschen Liegruppe $U(1)$ der komplexen, unimodularen Zahlen können durch ihre Phase charakterisiert werden, $U = e^{i\alpha}$ mit $\alpha \in [-\pi, \pi)$. Eine Funktion $f : U(1) \rightarrow \mathbb{C}$ ist dann eine 2π -periodische Funktion der reellen Phase α . Die Mittelbildung ist gegeben durch folgendes Integral über den Parameterraum:

$$\mathcal{M}(f) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\pi}^{\pi} d\alpha f(e^{i\alpha}). \quad (12.57)$$

Die Invarianz bezüglich Linkstranslationen beweist man wie folgt,

$$\frac{1}{2\pi} \int_{-\pi}^{\pi} d\alpha f(\Omega e^{i\alpha}) \stackrel{\Omega = e^{i\tilde{\alpha}}}{=} \frac{1}{2\pi} \int_{-\pi}^{\pi} d\alpha f(e^{i\tilde{\alpha} + i\alpha}) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\pi}^{\pi} d\alpha f(e^{i\alpha}).$$

Die Zustandssumme einer $U(1)$ -Gittereichtheorie hat damit die Form

$$Z_{\Lambda} = \int_{-\pi}^{\pi} \cdots \int_{-\pi}^{\pi} \prod_{\ell \in E} \frac{d\alpha_{\ell}}{2\pi} \exp \left\{ \frac{1}{e^2} \sum_p (1 - \cos \sum_{\ell \in \partial p} \alpha_{\ell}) \right\}. \quad (12.58)$$

Das Argument der Kosinus-Funktion enthält die Summe derjenigen Phasen, die den 4 Kanten zugeordnet sind die p beranden.

Wie sieht nun das invariante Haarmaß von $SU(2)$ aus? Dazu überlegen wir uns, was die Linkstranslation $U \rightarrow \Omega U$ auf $SU(2)$ geometrisch bedeutet. Die Gruppenele-

mente von $SU(2)$ kann man wie folgt ein-eindeutig parametrisieren,

$$\alpha \longrightarrow U(\alpha) = \begin{pmatrix} \alpha_1 + i\alpha_2 & \alpha_3 + i\alpha_4 \\ -\alpha_3 + i\alpha_4 & \alpha_1 - i\alpha_2 \end{pmatrix} \quad \text{mit} \quad \alpha = \begin{pmatrix} \alpha_1 \\ \alpha_2 \\ \alpha_3 \\ \alpha_4 \end{pmatrix} \in S^3. \quad (12.59)$$

Als Mannigfaltigkeit ist die Gruppe $SU(2)$ gleich der Sphäre S^3 . Die Linkstranslation $U \rightarrow \Omega U$ mit dem Gruppenelement $\Omega = U(\beta)$ ist dann im Parameterraum gegeben durch

$$U(\beta)U(\alpha) = U(O(\beta)\alpha) \quad \text{mit} \quad O(\beta)\alpha = \begin{pmatrix} \beta_1 & -\beta_2 & -\beta_3 & -\beta_4 \\ \beta_2 & \beta_1 & -\beta_4 & \beta_3 \\ \beta_3 & \beta_4 & \beta_1 & -\beta_2 \\ \beta_4 & -\beta_3 & \beta_2 & \beta_1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \alpha_1 \\ \alpha_2 \\ \alpha_3 \\ \alpha_4 \end{pmatrix}. \quad (12.60)$$

Wegen $\beta \in S^3$ ist $O(\beta)$ eine orthogonale 4×4 -Matrix, $O^T O = 1$, und damit ist $O(\beta)\alpha$ eine Drehung von α . Nun ist aber die von \mathbb{R}^4 auf S^3 induzierte Volumenform dreihinvariant und damit invariant unter Linkstranslationen (und Rechtstranslationen). Normieren wir die Volumenform, dann erhalten wir das *eindeutige Haarmaß* auf $SU(2)$,

$$dU = \delta(\alpha^2 - 1) d\alpha_1 d\alpha_2 d\alpha_3 d\alpha_4. \quad (12.61)$$

Alternativ können wir für die Punkte auf $\sim S^3$ „Kugelkoordinaten“ einführen,

$$\begin{pmatrix} \alpha_1 \\ \alpha_2 \\ \alpha_3 \\ \alpha_4 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos \theta \\ \sin \theta \cos \psi \\ \sin \theta \sin \psi \cos \varphi \\ \sin \theta \sin \psi \sin \varphi \end{pmatrix}. \quad (12.62)$$

Dies führt auf folgende Parametrisierung der Gruppenelemente,

$$U(\theta, \psi, \varphi) = \begin{pmatrix} \cos \theta + i \sin \theta \cos \psi & \sin \theta \sin \psi e^{i\varphi} \\ -\sin \theta \sin \psi e^{-i\varphi} & \cos \theta - i \sin \theta \cos \psi \end{pmatrix}, \quad (12.63)$$

wobei die auftretenden Winkel eingeschränkte Wertebereiche haben,

$$0 < \theta < \pi, \quad 0 < \psi < \pi \quad \text{und} \quad 0 < \varphi < 2\pi. \quad (12.64)$$

In diesen Koordinaten lautet das Haar-Maß von $SU(2)$

$$dU = \frac{1}{2\pi^2} \sin^2 \theta \cdot \sin \psi \, d\theta d\psi d\varphi. \quad (12.65)$$

Für allgemeine Liegruppen kann man sich das Haar-Maß wie folgt beschaffen. Man parametrisiert die n -dimensionale Gruppe mit Parametern $\{\alpha^1, \dots, \alpha^n\} = \alpha$, so dass $U = U(\alpha)$. Dann ist dUU^{-1} eine Linearkombination der Differentiale $d\alpha^a$ mit Koeffizienten in der Lie-Algebra \mathfrak{g} und

$$ds^2 = -\text{tr} (dUU^{-1} dUU^{-1}) = \text{tr} \left(\frac{\partial U^{-1}}{\partial \alpha^a} \frac{\partial U}{\partial \alpha^b} \right) = g_{ab} d\alpha^a d\alpha^b \quad (12.66)$$

definiert eine links- und rechts-invariante Metrik auf der Gruppe. Für unitäre Gruppen ist $U^{-1}dU$ anti-hermitesch und mit dem Minus in (12.66) hat die Metrik dann positive Signatur. Das Haar-Maß ist dann gleich die zur invarianten Metrik gehörende Volumenform,

$$dU = \text{const} \sqrt{g} d\alpha^1 \cdots d\alpha^n, \quad g = \det(g_{ab}). \quad (12.67)$$

Die positive Proportionalitätskonstante wird so gewählt, dass das Volumen der Gruppe gleich Eins ist. Zum Beispiel ist die invariante Metrik für $SU(2)$ für die Parametrisierung (12.63) gleich

$$ds^2 = d\theta^2 + \sin^2 \theta d\psi^2 + \sin^2 \theta \sin^2 \psi d\phi^2. \quad (12.68)$$

und die zugehörige normierte Volumenform ist das Haar-Maß in (12.65). Es definiert ein *invariantes Skalarprodukt* auf den Funktionen $\mathcal{G} \rightarrow \mathbb{C}$,

$$(f, g) \equiv \int_{\mathcal{G}} \bar{f}(U) g(U) dU. \quad (12.69)$$

12.3.1 Das Theorem von Peter und Weyl

Man kann sich eine vollständige orthonormierte Basis des Hilbertraums $L_2(\mathcal{G}, dU)$ beschaffen, wenn man *alle* irreduziblen Darstellungen der Gruppe betrachtet. Eine *Darstellung* R der Gruppe \mathcal{G} ist eine strukturerhaltende Abbildung (ein Gruppenhomomorphismus) der Gruppe in die Menge der linearen Abbildungen eines Vektorraums V ,

$$R : \mathcal{G} \longrightarrow L(V), \quad R(U_1 U_2) = R(U_1) R(U_2), \quad R(\mathbb{1}) = \mathbb{1}. \quad (12.70)$$

Die Dimension d_R der Darstellung R ist gleich der Dimension des Darstellungsraumes V . Wir wollen im Folgenden annehmen, dass die Gruppe eine Mittelbildung besitzt. Endliche und kompakte Gruppen besitzen eine Mittelbildung. Für eine Gruppe mit Mittelbildung ist jede Darstellung äquivalent zu einer unitären Darstellung.

Eine Darstellung heisst *irreduzibel*, wenn die linearen Abbildungen $\{R(U)|U \in \mathcal{G}\}$ keinen gemeinsamen invarianten echten Unterraum von V haben. Es sei nun $\{R(U)\}$ die Menge aller irreduziblen Darstellungen. Es gilt der wichtige

Satz von Peter-Weyl: *Die Funktionen $\{R(U)^{ab}\}$ definieren ein vollständiges Orthogonalsystem von $L_2(dU)$, und*

$$(R^{ab}, R'^{cd}) \equiv \int \bar{R}^{ab}(U) R'^{cd}(U) dU = \frac{\delta_{RR'}}{d_R} \delta_{ac} \delta_{bd}, \quad (12.71)$$

wobei $d_R = \text{tr } R(\mathbb{1})$ die Dimension der Darstellung R ist.

Dieses Theorem hat als wichtige Konsequenz das

Lemma: *Die Charakteren $\chi_R(U) = \text{tr } R(U)$ der irreduziblen Darstellungen bilden ein vollständiges Orthonormalsystem für den Raum der invarianten Funktionen, $f(U) = f(\Omega U \Omega^{-1})$ in $L_2(dU)$. Insbesondere gilt*

$$(\chi_R, \chi_{R'}) = \delta_{RR'}. \quad (12.72)$$

Dieses Lemma ist nützlich bei der Zerlegung einer reduziblen Darstellung in irreduzible Anteile. Weitere hilfreiche Identitäten liefert das

Lemma: *Es gelten die folgenden Formeln*

$$\text{Orthogonalität: } (R^{ab}, \chi_{R'}) = (\chi_{R'}, R^{ab}) = \frac{\delta_{RR'}}{d_R} \delta_{ab} \quad (12.73)$$

$$\text{Verleimung: } \int d\Omega \chi_R(U \Omega^{-1}) \chi_{R'}(\Omega V) = \frac{\delta_{RR'}}{d_R} \chi_R(UV) \quad (12.74)$$

$$\text{Spaltung: } \int d\Omega \chi_R(\Omega U \Omega^{-1} V) = \frac{1}{d_R} \chi_R(U) \chi_R(V) \quad (12.75)$$

$$\text{Zerlegung der Eins: } \sum_R d_R \chi_R(U) = \delta(\mathbb{1}, U). \quad (12.76)$$

Diese werden zum Beispiel bei der Entwicklung für starke Kopplungen benötigt. Die Verleimungseigenschaft beweist man leicht:

$$\int d\Omega \chi_R(U \Omega^{-1}) \chi_{R'}(\Omega V) = \sum_{a,b,c,d} R^{ab}(U) \int d\Omega \bar{R}^{ab}(\Omega) R'^{cd}(\Omega) R'^{dc}(V)$$

$$= \sum_{a,b,c,d} R^{ab}(U)R'^{dc}(V) \frac{\delta_{RR'}}{d_R} \delta_{ac} \delta_{bd} = \frac{\delta_{R,R'}}{d_R} \chi_R(UV).$$

Auch die Zerlegung der Eins ist mit Hilfe der Orthogonalitätsrelationen (12.70) schnell einzusehen. Für weitere Formeln verweise ich auf die reichhaltige Literatur über Gruppen und Darstellungen.

12.4 Zweidimensionale Modelle

Wir berechnen die Zustandssummen von 2-dimensionalen Eichtheorien auf dem quadratischen Gitter mit periodischen Randbedingungen. Wir beginnen mit Abelschen Eichtheorien, deren Zustandssumme ähnlich einfach berechnet werden kann wie für eindimensionale Spinmodelle. Für nicht-Abelsche Eichtheorien ist die Berechnung komplizierter und macht wesentlichen Gebrauch von den Eigenschaften des Haar-Maßes.

12.4.1 \mathbb{Z}_2 -Eichtheorie

Die dynamischen Variablen sind die $|E| = 2V$ Linkvariablen $U_\ell \in \{-1, 1\}$ und die invariante Integration ist die Mittelbildung $\frac{1}{2} \sum_{U_\ell}$ auf der Eichgruppe \mathbb{Z}_2 . Zur Umformung der Zustandssumme benutzen wir denselben Trick wie bei der Hochtemperarentwicklung für das Ising-Modell (siehe 9.2),

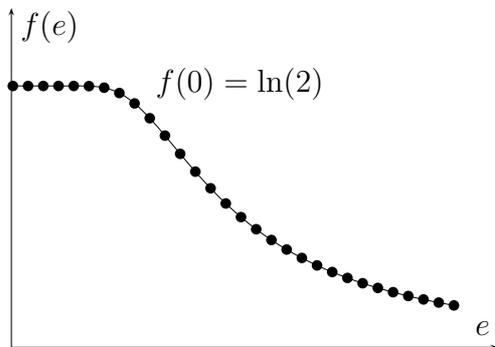
$$Z = \frac{1}{2^{|E|}} \sum_{\{U\}} e^{-\sum_p \beta(1-U_p)} = \frac{1}{2^{|E|}} \left(\frac{\cosh \beta}{e^\beta} \right)^V \sum_{\{U\}} \prod_p (1 + \tanh \beta U_p). \quad (12.77)$$

Für die \mathbb{Z}_2 -Eichtheorie führt dies zu einer Entwicklung in Potenzen von $\tanh \beta$ mit $\beta \sim 1/e^2$, also einer Entwicklung die für starke Kopplung gelten sollte. Wegen

$$\sum_{U_\ell} U_\ell^k = \begin{cases} 2 & k \text{ gerade} \\ 0 & k \text{ ungerade,} \end{cases} \quad (12.78)$$

tragen nach Ausmultiplikation des Produktes auf der rechten Seite in (12.77) nur die Terme 1 und $(\tanh \beta)^V \prod_p U_p$ bei, so dass

$$Z = \left(\frac{\cosh \beta}{e^\beta} \right)^V (1 + (\tanh \beta)^V) = \left(\frac{1 + e^{-2\beta}}{2} \right)^V + \left(\frac{1 - e^{-2\beta}}{2} \right)^V \quad (12.79)$$



Im thermodynamischen Grenzfall $V \rightarrow \infty$ strebt die freie Energiedichte $f = -\log(Z)/V$ gegen den einfachen Ausdruck

$$f_{V \rightarrow \infty}(\beta) = \log 2 - \log(1 + e^{-2\beta}).$$

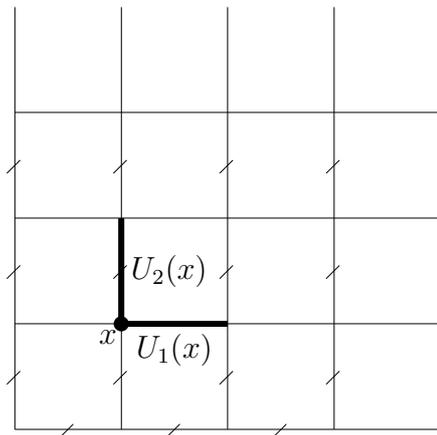
Für schwache Kopplung oder grosse β ist sie gleich $\log(2)$. Im starken Kopplungslimes strebt sie wie $1/e^2$ gegen 0. Die innere Energiedichte ist $u(\beta) = (e^\beta + 1)^{-1}$.

12.4.2 $U(1)$ -Eichtheorie

Die Rechnung vereinfacht sich, wenn wir die Link-Variablen $U_\ell = e^{i\alpha_\ell}$ in der Zustandssumme

$$Z = e^{-\beta V} \int \prod_\ell dU_\ell \prod_p e^{\frac{1}{2}\beta U_p + \frac{1}{2}\beta \bar{U}_p}, \quad U_p = \prod_{\ell \in \partial p} U_\ell \tag{12.80}$$

geschickt transformieren.



Als eichinvariante Variablen können wir alle Plakettenvariablen U_p und die *Polyakov-Schleifen*

$$P(x_1) = \prod_{n=1}^{N_2} U_2(x + ne_2),$$

$$P(x_2) = \prod_{n=1}^{N_1} U_1(x + ne_1). \tag{12.81}$$

wählen. Aber für periodische Randbedingungen sind diese Variablen abhängig, da $\prod_p U_p = 1$. Nur $V - 1$ Plakettenvariablen sind

also unabhängig und wir wählen diese als ein Teil der neuen Variablen. Nun kann man auch leicht einsehen, dass $P(x_1 + m)P^{-1}(x_1)$ gleich dem Produkt derjenigen Plakettenvariablen ist, die durch die beiden zu $P(x_1)$ und $P(x_1 + m)$ gehörigen Schleifen eingeschlossen werden. Deshalb kann $P(x_1 + m)$ durch $P(x_1)$ und die Plakettenvariablen ausgedrückt werden. Das Gleiche gilt auch für $P(x_2)$. Als weitere *unabhängige* eichinvariante Variablen verbleiben also nur jeweils eine Polyakovschleife in die

Zeit- und eine in die Raumrichtung. Damit ergeben sich $V + 1$ unabhängige eichinvariante Variablen. Zusammen mit den $N_1(N_2 - 1) + (N_1 - 1) = V - 1$ *eichvarianten* Linkvariablen der mit einem Schrägstrich gekennzeichneten Links E' ergibt sich der vollständige Satz von $2V$ Variablen,

$$\{U_p | p = 1, \dots, V - 1\}, \quad P_1, P_2 \quad \text{und} \quad \{U_\ell | \ell \in E'\}. \quad (12.82)$$

Wegen der Links- und Rechtsinvarianz des Haar-Maßes folgt

$$Z = e^{-\beta V} \int \prod_{p=1}^{V-1} dU_p \prod_{p=1}^V e^{\frac{1}{2}\beta(U_p + \bar{U}_p)} \int dP_1 dP_2 \int \prod_{\ell \in E'} dU_\ell. \quad (12.83)$$

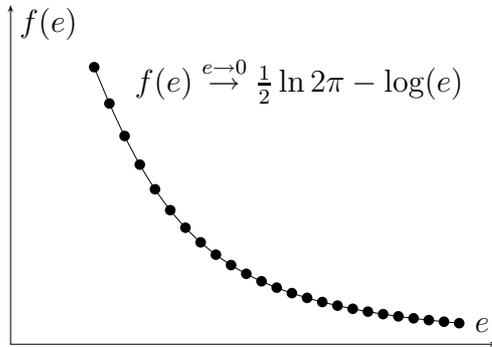
Darin ist die Plakettenvariable U_V wegen $\prod U_p = 1$ von den anderen Plakettenvariablen abhängig. Also erhalten wir

$$Z = e^{-\beta V} \prod_{p=1}^V \int dU_p e^{\frac{1}{2}\beta(U_p + \bar{U}_p)} \delta(1, U_1 U_2 \cdots U_V). \quad (12.84)$$

Für die Gruppe $U(1)$ sind alle irreduziblen Darstellungen R_n eindimensional und mit $R_n(U) = U^n = e^{in\alpha}$, lautet die Formel (12.76) für die Vollständigkeit der Charaktere $\delta(1, U) = \sum U^n$ und ist äquivalent zur Fourierdarstellung der δ -Distribution. Dies führt auf folgende explizite Formel für die Zustandssumme der 2-dimensionalen $U(1)$ Gittereichtheorie mit periodischen Randbedingungen,

$$\begin{aligned} Z &= e^{-\beta V} \sum_{n \in \mathbb{Z}} \prod_{p=1}^V \int \left(dU_p e^{\beta(U_p + \bar{U}_p)} U_p^n \right) \\ &= e^{-\beta V} \sum_{n \in \mathbb{Z}} \left(\int_{-\pi}^{\pi} \frac{d\alpha}{2\pi} e^{\beta \cos \alpha + in\alpha} \right)^V = e^{-\beta V} \sum_{n \in \mathbb{Z}} I_n(\beta)^V. \end{aligned} \quad (12.85)$$

Die freie Energiedichte hat die Form



$$f(\beta, V) = \beta - \frac{1}{V} \log \left(\sum_{n \in \mathbb{Z}} I_n(\beta)^V \right). \quad (12.86)$$

Wegen $I_0(\beta) > I_1(\beta) > \dots$ erhalten wir im thermodynamischen Limes die freie Energiedichte

$$f(\beta) = \beta - \log I_0(\beta). \quad (12.87)$$

Für schwache Kopplungen divergiert $f(e)$ wie $-\log(e)$. Im starken Kopplungslimes strebt die Funktion wie $1/e^2 - 1/4e^4 + \dots$ gegen Null. Die Abhängigkeit von e ist in der obigen Figur geplottet.

Aufgrund der periodischen Randbedingung mussten wir bei der Berechnung der Zustandssumme $U_1 \cdots U_V = 1$ fordern. Hätten wir diesen Randeffect vernachlässigt, dann würde in der Summe in (12.85) nur der Term mit $n = 0$ auftreten. Im thermodynamischen Limes würden wir dann wieder das Resultat (12.87) für die freie Energiedichte erhalten. Für $V \rightarrow \infty$ ist die freie Energiedichte insensitiv auf die periodischen Randbedingungen. In [82] wurde gezeigt, dass dies auch für allgemeinere Randbedingungen in 2-dimensionalen Eichtheorien der Fall ist.

12.4.3 \mathbb{Z}_N -Eichtheorien

Dieselbe Variablenänderung führt für die Zustandssumme einer \mathbb{Z}_N -Theorie

$$Z = \sum_{\{U\}} e^{-\beta + \beta \Re(U_p)}, \quad U_\ell, U_p \in \{z = e^{2\pi i/N}, z^2, \dots, z^N = 1\}, \quad (12.88)$$

mit Hilfe der Darstellung

$$\frac{1}{N} \sum_{n=1}^N e^{2\pi i n k/N} = \delta_{(k \bmod N), 0} \quad (12.89)$$

für das N -periodische Kronecker-Symbol, auf folgende Reihendarstellung für die Zustandssumme

$$Z = e^{-\beta V} \sum_{n=1}^N F_N(n, \beta)^V, \quad F_N(n, \beta) = \frac{1}{N} \sum_{m=1}^N e^{\beta \cos(2\pi m/N) + 2\pi i m n/N}. \quad (12.90)$$

Für $N = 2$ stimmt dies mit dem Resultat (12.79) für die \mathbb{Z}_2 -Gittereichtheorie überein und für $N \rightarrow \infty$ mit der Formel (12.85) für die $U(1)$ -Theorie.

12.4.4 SU(2)-Eichtheorie

Ähnlich wie für die $U(1)$ -Eichtheorie wählen wir die Plakettenvariablen und eine Menge von Linkvariablen, die zur Spezifikation einer Gitterkonfiguration nötig sind, als unabhängige Variablen. Man beachte, dass in einer nicht-Abelschen Eichtheorie die ungespurten Plakettenvariablen nicht mehr eichinvariant sind. Wir werden Randeffekte, und hier insbesondere eine Korrelation zwischen den Plakettenvariablen aufgrund der periodischen Randbedingungen vernachlässigen. Diese Korrelation ist nicht mehr so stark wie für Abelsche Theorien und schwieriger zu implementieren. Für eine Diskussion der Randbedingungen verweise ich auf eine Arbeit von Dosch und Mueller [82].

Parametrisieren wir die Plakettenvariablen in der Wilson-Wirkung (12.51) gemäß (12.63), dann lautet die Wilson-Wirkung

$$S_{\text{eich}} = \beta \sum_p (1 - \cos \theta_p) \quad (12.91)$$

mit $\theta_p \in [0, \pi)$. Transformieren wir wieder auf die Plakettenvariablen und die verbleibenden Linkvariablen (von denen der Integrand nicht abhängt), dann finden wir

$$Z(\beta, V) = e^{-\beta V} \int \prod dU_p \prod_{p=1}^V e^{\beta \cos \theta_p} = e^{-\beta V} \left(\int dU e^{\beta \cos \theta} \right)^V. \quad (12.92)$$

Hier hängt der Integrand $\cos \theta = \text{tr } U/2$ nur von der Konjugationsklasse von U ab. Deshalb vereinfacht sich das Haarmaß (12.65) auf das reduzierte Haarsche Maß,

$$d\mu_{\text{red}}(U) = \frac{2}{\pi} \sin^2 \theta d\theta. \quad (12.93)$$

Mit Hilfe einer partiellen Integration finden wir für das letzte Integral in (12.92)

$$\int dU e^{\beta \cos \theta} = -\frac{2}{\pi\beta} \int d\theta \sin \theta \frac{d}{d\theta} e^{\beta \cos \theta} = \frac{2}{\pi\beta} \int d\theta \cos \theta e^{\beta \cos \theta} = \frac{2}{\beta} I_1(\beta). \quad (12.94)$$

Benutzen wir dieses Resultat in (12.92) dann ergibt sich die Zustandssumme

$$Z(\beta) = e^{-\beta V} \left(\frac{2}{\beta} I_1(\beta) \right)^V. \quad (12.95)$$

Die zugehörigen freie Energiedichte ist volumenunabhängig,

$$f(\beta) = \beta - \log \left(\frac{2I_1(\beta)}{\beta} \right), \tag{12.96}$$

und hat eine ähnliche Abhängigkeit von der Kopplungskonstanten wie die freie Energiedichte der $U(1)$ -Theorie. Für starke Kopplungen ist $f \sim 1/e^2 - 1/8e^4 + \dots$ und für schwache Kopplungen $f \sim 3 \log(e) + \frac{1}{2} \log(\pi/2)$.

12.5 Observablen der reinen Eichtheorien

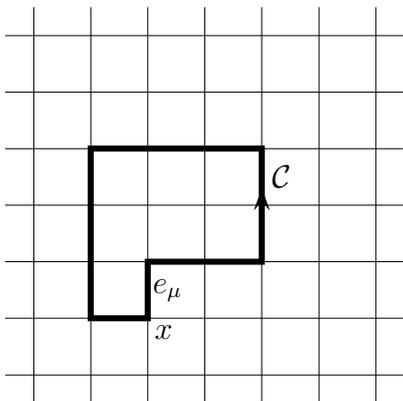
Da die Gitterwirkungen und das Haar-Maß eichinvariant sind, ist das normierte Maß im Funktionalintegral

$$d\mu[U] = \frac{1}{Z} e^{-S_{\text{eich}}[U]} \prod_{\ell \in E} dU_\ell, \quad Z = \int e^{-S_{\text{eich}}[U]} \prod_{\ell \in E} dU_\ell, \tag{12.97}$$

ebenfalls eichinvariant. Für ein endliches Gitter in d Dimensionen ist dies ein $d|\Lambda||\mathcal{G}|$ -dimensionales Integral. Zum Beispiel, für eine 4-dimensionale $SU(2)$ -Eichtheorie auf dem hyperkubischen 16^4 Gitter wäre es ein $4 \cdot 16^4 \cdot 3 = 786\,432$ -dimensionales Integral. Wegen der Eichinvarianz des Maßes folgt für Erwartungswerte von Funktionen der dynamischen Variablen

$$\langle F[U] \rangle = \int d\mu[U] F[U] = \int d\mu[U] F[U^\Omega] = \langle F[U^\Omega] \rangle, \tag{12.98}$$

wobei $U = \{U_\mu(x)\}$ eine Gitterfeld bezeichnet und $U^\Omega = \{\Omega(x + e_\mu)U_\mu(x)\Omega^{-1}(x)\}$ das mit einer beliebigen Eichtransformation $\{\Omega(x)\}$ transformierte Feld. Offensichtlich ist es nur sinnvoll, Erwartungswerte von *eichinvarianten Größen* zu betrachten.



Eichinvariante Funktionen der Variablen $\{U_\mu(x)\}$ sind die Spuren von Produkten von U 's entlang geschlossener Wege (Schleifen). Wir definieren

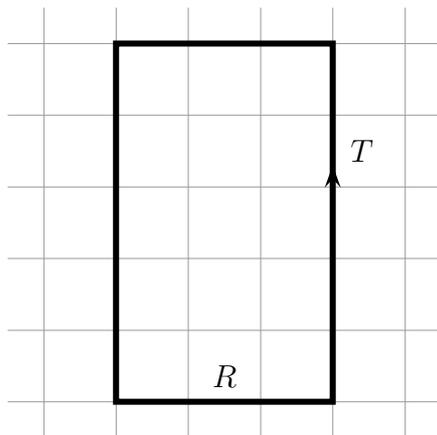
$$W[\mathcal{C}] = \text{tr} \prod_{i=1}^L U_{\mu_i}(x_i) \Big|_{\mathcal{C}}. \tag{12.99}$$

Dabei beschreibt (x_i, μ_i) mit $x_{i+1} = x_i + e_{\mu_i}$ und $x_{L+1} = x_1$ eine Folge von gerichteten Kanten zu der Schleife \mathcal{C} der Länge L .

Man kann sich überlegen, dass die allgemeinste eichinvariante Größe eine Funktion der Paralleltransporter entlang geschlossener Wege ist. Die Bezeichnung für $W[C]$ variiert leider in der Literatur. Oft heissen sie *Wilson-Schleifen*. Manchmal versteht man unter einer Wilson-Schleife auch nur das Produkt der U 's entlang einer Schleife, also das Argument der Spur in (12.99), manchmal auch den Erwartungswert von W . Wir werden im folgenden die eichinvarianten W in (12.99) als Wilson-Schleifen bezeichnen.

Wilson-Schleifen zu geschlossenen Wegen, die sich um ein periodisches Gitter herumwinden, heissen auch *Polyakov-Schleifen*. Sie spielen eine wichtige Rolle bei der Untersuchung von Gittereichtheorien bei endlichen Temperaturen. Der Erwartungswert der Polyakovschleifen ist ein Ordnungsparameter für den Confinement-Deconfinement Phasenübergang in reinen Eichtheorien. Die Dynamik dieser Schleifenvariablen wird zur Zeit am Lehrstuhl Quantentheorie untersucht [83].

12.5.1 Die Strings Spannung



Es sei nun $W[R, T]$ eine Wilson-Schleife zu einer ebenen und rechteckigen Schleife mit den Kantenlängen R und T . Die Funktion

$$V_{q\bar{q}}(R) = - \lim_{T \rightarrow \infty} \frac{1}{T} \log \langle W[R, T] \rangle \quad (12.100)$$

wird als statisches $q\bar{q}$ -Potential interpretiert. Die Größe

$$\sigma = \lim_{R \rightarrow \infty} \frac{V_{q\bar{q}}(R)}{R} \quad (12.101)$$

heisst *Strings Spannung*. Sie ist ein Ordnungsparameter zur Unterscheidung zwischen Confinement bzw. Nicht-Confinement in einer reinen Eichtheorie.

Mit der Interpretation von $V_{q\bar{q}}(R)$ als Potential zwischen zwei von aussen eingebrachten statischen Ladungen bedeutet $\sigma \neq 0$, dass die potentielle Energie mit dem Abstand der Ladungen zunimmt, und für asymptotisch entfernte Ladungen unendlich groß wird, so dass dieser Zustand in einer



dynamischen Theorie nicht auftritt. Das lineare Anwachsen der Energie mit dem

Abstand kann erklärt werden, wenn sich zwischen den Ladungen ein Flußschlauch mit konstanter Energiedichte bilden würde. Dann wäre die Energie des Schlauches proportional zu seiner Länge und entsprechend die Kraft zwischen den Ladungen konstant. Für eine verschwindende Stringspannung nimmt dagegen die potentielle Energie für sehr große Abstände kaum mehr zu. Es sollte also möglich sein mit endlichem Energieaufwand die Ladungen zu trennen.

Die Ladungen treten in dieser Betrachtung nur als „unendlich schwere“ Objekte ohne eigene Dynamik auf. In Wirklichkeit wird die Energie zwischen zwei sich entfernenden Ladungen nur solange zunehmen, bis die potentielle Energie ausreicht, um die Paarproduktion aus dem Vakuum zu zünden. Die erzeugten Teilchen schirmen die individuellen Ladungen ab und es entstehen zwei ladungsneutrale Zustände, die sich voneinander entfernen können.

WILSON schlug als Kriterium für Confinement oder Nicht-Confinement in einer reinen Eichtheorie das *Flächen-* oder *Umfangsgesetz* für den Erwartungswert der Wilson-Schleife vor,

$$\begin{aligned} \langle W[R, T] \rangle &\sim e^{-TV_{q\bar{q}}(R)} \sim e^{-\text{Fläche}} && \text{Confinement} \\ \langle W[R, T] \rangle &\sim e^{-TV_{q\bar{q}}(R)} \sim e^{-\text{Umfang}} && \text{kein Confinement.} \end{aligned} \quad (12.102)$$

SEILER und BORGS u.a. konnten beweisen, dass $V_{q\bar{q}}(R)$ monoton anwächst, $V'_{q\bar{q}} \geq 0$, aber nicht stärker als linear ansteigen kann, $V''_{q\bar{q}} \leq 0$, siehe zum Beispiel [84]. Für große Abstände hat das statische Potential die Form

$$V_{q\bar{q}}(R) \sim \sigma R + \text{const} - \frac{c}{R} + o(R^{-1}) \quad (12.103)$$

mit einer universellen und positiven Konstanten c . Der Term $\sim 1/R$ heisst *Lüscher-Term*. Er hat seinen Ursprung in den Quantenfluktuationen des Fluss-Schlauches zwischen den beiden statischen Ladungen [85].

Wir kommen zu einer Begründung, warum $V(R)$ als statisches $q\bar{q}$ -Potential angesehen werden kann. In der Elektrodynamik ändert sich bei Anwesenheit einer äußeren 4-er Stromdichte $j^\mu(x)$ der Gewichtsfaktor im Funktionalintegral gemäß

$$\exp(iS) \longrightarrow \exp\left(iS + i \int d^4x j^\mu A_\mu\right). \quad (12.104)$$

Nun parametrisiere $z^\mu(\tau)$ die Weltlinie \mathcal{C} eines elektrisch geladenen Punktteilchens. In der klassischen Elektrodynamik ist die 4-er Geschwindigkeit \dot{z}^μ zeitartig. Für die

Stromdichte des bewegten Teilchens

$$j^\mu(x) = e \int_C d\tau \dot{x}^\mu(\tau) \delta^4(x - z(\tau))$$

lautet dann der zusätzliche Phasenfaktor in (12.104) folgendermassen,

$$\exp\left(i \int d^4x j^\mu A_\mu\right) = \exp\left(ie \int_C dz^\mu A_\mu(z)\right) = \exp\left(ie \int_C A\right), \quad (12.105)$$

wobei längs des durch $z(\tau)$ spezifizierten Weges C zu integrieren ist. Die euklidische Form erhält man durch die Substitutionen $dz^0 \rightarrow -idz^0$ und $A_0 \rightarrow iA_0$. Die Phase (12.105) bleibt beim Übergang zur euklidische Theorie eine Phase. Wählt man für C eine Schleife, so entspricht die Zustandssumme in Gegenwart eines stationären Stromes,

$$\frac{1}{Z} \int \mathcal{D}A_\mu \exp\left(-S_E[A] + ie \oint_C A\right) = \left\langle \exp\left(ie \oint_C A\right) \right\rangle = \langle W[C] \rangle, \quad (12.106)$$

genau der Kontinuumsversion des Erwartungswertes der Wilson-Schleife.

12.6 Nicht-Abelsche 2d-Eichtheorien

Wir betrachten zwei bei x beginnende Schleifen C_x, C'_x mit *einer gemeinsamen Kante*

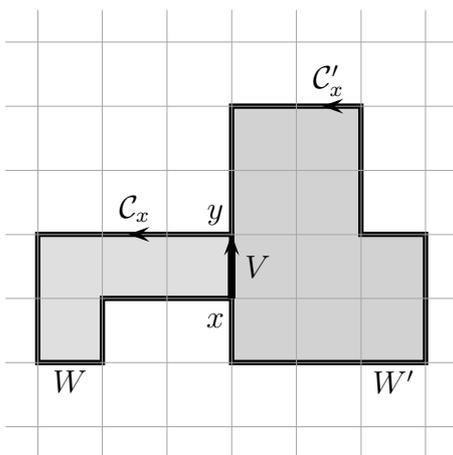
x zum Nachbarpunkt y . Die Variable auf der gemeinsamen Kante von x nach y sei V . Dann hat der Paralleltransporter längs C_x die Form $U_{C_x} = WV$, und der Transporter längs C'_x die Form $V^{-1}W'$. Es sei nun f eine Klassenfunktion. Diese kann als Linearkombination der Charakteren geschrieben werden,

$$f(U) = \sum_R c_R \chi_R(U) \quad (12.107)$$

mit Entwicklungskoeffizienten

$$c_R = \int dU \bar{\chi}_R(U) f(U). \quad (12.108)$$

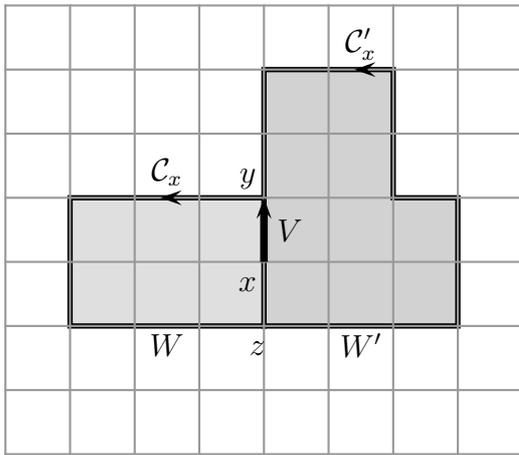
Diese Charakterenentwicklung gestattet es uns über die gemeinsame Linkvariable V in der Produktfunktion $f(U_{C_x})f(U_{C'_x})$ zu integrieren: Mit der Verleimungsregel (12.74)



finden wir

$$\begin{aligned} \int dV f(U_C) f(U_{C'}) &= \sum_{R,R'} c_R c_{R'} \int dV \bar{\chi}_R(WV) \chi_{R'}(V^{-1}W') \\ &= \sum_R \frac{c_R^2}{d_R} \chi_R(WW') = \sum_R \frac{c_R^2}{d_R} \chi_R(U_{C \circ C'}). \end{aligned} \quad (12.109)$$

Berühren sich zwei Schleifen an mehreren *zusammenhängenden* Kanten, dann soll



man nur eine der gemeinsamen Kanten verleimen. Verleimen wir die Schleifen C_x und C'_x in der nebenstehenden Figur längs x, y , dann hebt sich in der Klassenfunktion $\chi_R(U_{C \circ C'})$ der Paralleltransporter von z nach x in C_x gegen diejenigen in C'_x weg. Nach Verleimung längs einer gemeinsamen Kante heben sich die Paralleltransporter aller mit der verleimten Kante verbundenen und auf beiden Schleifen liegenden Kanten auf der rechten Seite von (12.109) weg. $U_{C \circ C'}$ ist dann der Paralleltransporter längs der äußeren Randkurve des von C und

C' eingeschlossenen Gebiets. Berühren sich C und C' und C' längs nicht verbundener Kanten, dann heben sich nur die Paralleltransporter der mit der verleimten Kante zusammenhängenden und auf C sowie C' liegenden Kanten weg.

Nun Verleimen wir die Schleife $C \circ C'$ längs einer gemeinsamen Kante mit einer dritten Schleife C'' . Der Paralleltransporter längs der gemeinsamen Schleife sei V' . Wir finden mit Hilfe von (12.109)

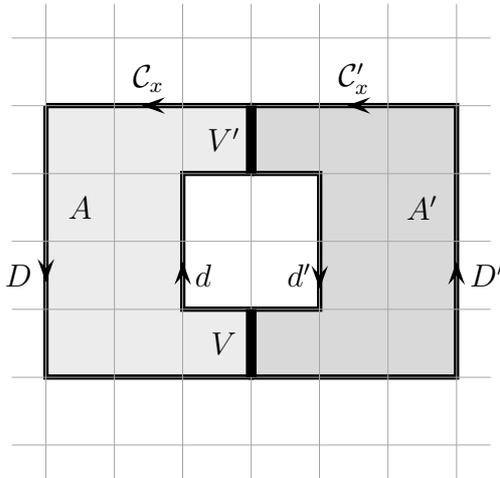
$$\begin{aligned} \int dV' dV f(U_C) f(U_{C'}) f(U_{C''}) &= \int dV \sum_R \frac{c_R^2}{d_R} \chi_R(WV) \sum_{R'} c_{R'} \chi_{R'}(V^{-1}W') \\ &= \sum_R \frac{c_R^3}{d_R^2} \chi_R(U_{C \circ C' \circ C''}). \end{aligned} \quad (12.110)$$

Beginnend mit den Plakettenvariablen iterieren wir den Verleimungsprozess. Jede Fläche A ohne Löcher ist die Vereinigung von Plaketten, $A = p_1 \cup \dots \cup p_n$. Verleimen

wir die Plaketten zur Fläche A , dann ergibt sich das *Migdalsche K-Funktional*

$$K_A(U_{\partial A}) \equiv \int \prod_{\ell=1}^{n-1} dV_\ell \prod f(U_{p_1}) \cdots f(U_{p_n}) = \sum_R d_R \left(\frac{c_R}{d_R} \right)^n \chi_R(U_{\partial A}). \quad (12.111)$$

Später werden wir noch die Verklebungsvorschrift für eine Fläche mit Loch brauchen. Wir folgen Migdal und definieren



$$K_{\partial A,o} = \int dV dV' K(U_{\partial A_1}) K(U_{\partial A_2}). \quad (12.112)$$

Für die zwei Funktionen rechts setzen wir die Reihenentwicklungen (12.111) ein. Mit Hilfe der Verleimungsregel kann über V' integriert werden. Es bleibt ein Integral der Form

$$\int dV \chi_R(V D D' V^{-1} d' d),$$

wobei D, D', d und d' die in der Figur eingezeichneten Randstücke der an zwei Kanten zusammengeklebten Flächen A und A' sind. Mit der Spaltungsregel (12.75) kann das Integral über V ausgeführt werden. Wir erhalten

$$K_{\partial A,o} = \sum_R \left(\frac{c_R}{d_R} \right)^{n+m} \chi_R(U_{D \circ D'}) \chi_R(U_{d \circ d'}), \quad (12.113)$$

wobei die Paralleltransporter um die äußere und innere Randkurve des zusammengesetzten Gebietes als Argumente auftreten.

12.6.1 Casimir Scaling von Polyakovschleifen

Bei endlichen Temperaturen hat das Gitter eine endliche Ausdehnung in die Euklidischen Zeitrichtung und die Linkvariablen zu Zeiten x^0 und $x^0 + \beta$ werden identifiziert. Hier ist β die inverse Temperatur und auf einem Gitter mit Gitterkonstanten ist $\beta = a N_0$. Dann gibt es nicht-zusammenziehbare Wilsonschleifen, die sich um die periodische Zeitrichtung winden. Für $a = 1$ haben diese die Form

$$P_x[U] = \text{tr } \mathcal{P}_x[U], \quad \mathcal{P}_x = U_0(N_0, \mathbf{x}) \cdots U_0(2, \mathbf{x}) U_0(1, \mathbf{x}). \quad (12.114)$$

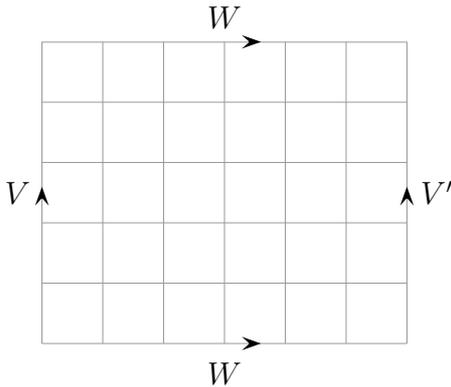
Diese speziellen Wilsonschleifen nennt man *Polyakovschleifen*. Ihr Erwartungswert ist gegeben durch

$$\langle P \rangle = \frac{1}{Z} \int \prod dU_\ell e^{-S_{\text{eich}}(U)} \text{tr } \mathcal{P}_x[U]. \quad (12.115)$$

Zur genaueren Untersuchung der Eichfelddynamik betrachtet man oft etwas allgemeiner anstelle des Charakters $\text{tr } \mathcal{P}$ in der definierenden Darstellung den Charakter der Paralletransporters \mathcal{P} in einer beliebigen Darstellung,

$$\langle \chi_{R_0}(\mathcal{P}) \rangle = \frac{1}{Z} \int \prod dU_\ell e^{-S_{\text{eich}}(U)} \chi_{R_0}(\mathcal{P}_x[U]). \quad (12.116)$$

Zur Berechnung der Zustandssumme im Nenner benutzen wir die Formel (12.111) mit $f(U) = \exp(-\beta \text{tr}(\mathbb{1} - \Re U_p))$. Die Fläche A in (12.111) sei die Vereinigung aller Plaketten des Gitters, so dass der Rand ∂A die Variablen V, V' und W enthält. Halten



wir die Linkvariablen auf dem räumlichen Rand fest, dann finden wir mit Hilfe der Spaltungsformel die Zustandssumme

$$\begin{aligned} Z &= \sum d_R (c_R/d_R)^V \int dW \chi_R(V^{-1}W^{-1}V'W) \\ &= \sum (c_R/d_R)^V \chi_R(V^{-1}) \chi_R(V') \end{aligned} \quad (12.117)$$

Wählen wir noch periodische Randbedingungen in die Raumrichtung dann ist $V' = V$ und

die Integration über V liefert

$$Z_{\text{per}} = e^{-\beta V} \sum_R \left(\frac{c_R(\beta)}{d_R} \right)^V, \quad c_R(\beta) = \int dU \bar{\chi}_R(U) e^{\beta \text{tr}(\Re U)/2}. \quad (12.118)$$

Für die Gruppe $SU(2)$ können die Koeffizienten c_R bestimmt werden. Für jeden Wert des Spins $j \in \mathbb{N}_0/2$ existiert eine irreduzible Darstellung der Dimension $n = 2j + 1$ mit den reellen Charakteren

$$\chi_j(U) = \text{tr } R_j(U) = \frac{\sin(2j+1)\theta}{\sin \theta}. \quad (12.119)$$

Insbesondere ist der Charakter der fundamentalen Darstellung $\chi_{1/2} = 2 \cos \theta$. Nun berechnen wir die (reskalierten) Koeffizienten

$$g_j(\beta) \equiv \frac{\beta}{2j+1} c_j(\beta) = \frac{\beta}{2j+1} \int d\mu_{\text{red}}(U) \chi_j(U) e^{\beta \chi_{1/2}(U)/2}. \quad (12.120)$$

Den ersten Koeffizienten haben wir bereits in (12.94) bestimmt

$$g_0(\beta) = 2I_1(\beta). \quad (12.121)$$

Die Ableitung von g_0 in (12.120) nach β führt dann auf $g'_0(\beta) - g_0(\beta)/\beta = g_{1/2}(\beta)$, oder auf $g_{1/2}(\beta) = 2I_2(\beta)$. Leiten wir nun $g_j(\beta)$ in (12.120) nach β ab und benutzen im entstehenden Integranden $\chi_j \chi_{1/2} = \chi_{j+1/2} + \chi_{j-1/2}$, dann erhalten wir die Rekursionsrelationen

$$\frac{dg_j}{d\beta} - \frac{g_j}{\beta} = \frac{1}{2}(g_{j+1/2} + g_{j-1/2}) + \frac{1}{2(2j+1)}(g_{j+1/2} - g_{j-1/2}).$$

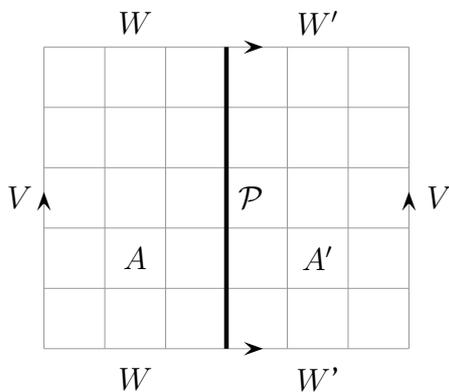
Dies sind genau die Rekursionsrelationen für die modifizierten Besselfunktionen,

$$\frac{dI_n}{d\beta} = \frac{1}{2}(I_{n+1} + I_{n-1}) \quad \text{und} \quad \frac{I_n}{\beta} = -\frac{1}{2n}(I_{n+1} - I_{n-1}), \quad (12.122)$$

mit der Dimension n der Darstellung R_j , so dass $g_j(\beta) = 2I_{2j+1}(\beta) \equiv 2I_n(\beta)$. Berücksichtigen wir noch $c_j = ng_j/\beta$, dann führt (12.118) auf folgenden expliziten Ausdruck für die Zustandssumme der zwei-dimensionalen $SU(2)$ -Gittereichtheorie

$$Z(\beta) = e^{-\beta V} \left(\frac{2}{\beta}\right)^V \sum_{n=1}^{\infty} I_n^V(\beta) \quad (n = 2j + 1). \quad (12.123)$$

Nun berechnen wir den Zähler im Erwartungswert (12.116). In Raumrichtung wählen wir periodische Randbedingungen und verleimen alle Plaketten mit Ausnahme der an die Polyakovschleife grenzenden Plaketten und der Randplaketten. Dann erhält man das Produkt $K(U_{\partial A})K(U_{\partial A'})\chi_{R_0}(\mathcal{P})$. Nun zerlegt man die Paralleltransporter längs ∂A und $\partial A'$ gemäß $WV^{-1}W^{-1}\mathcal{P}$ und $\mathcal{P}^{-1}W'^{-1}VW'$ und integriert über W und W' mit Hilfe der Spaltungsregel. Man verbleibt mit einem Ausdruck $\chi_R(V^{-1})\chi_R(\mathcal{P})\chi_{R'}(\mathcal{P}^{-1})\chi_{R'}(V)\chi_{R_0}(\mathcal{P})$. Nach Integration über V reduziert sich die



wir periodische Randbedingungen und verleimen alle Plaketten mit Ausnahme der an die Polyakovschleife grenzenden Plaketten und der Randplaketten. Dann erhält man das Produkt $K(U_{\partial A})K(U_{\partial A'})\chi_{R_0}(\mathcal{P})$. Nun zerlegt man die Paralleltransporter längs ∂A und $\partial A'$ gemäß $WV^{-1}W^{-1}\mathcal{P}$ und $\mathcal{P}^{-1}W'^{-1}VW'$ und integriert über W und W' mit Hilfe der Spaltungsregel. Man verbleibt mit einem Ausdruck $\chi_R(V^{-1})\chi_R(\mathcal{P})\chi_{R'}(\mathcal{P}^{-1})\chi_{R'}(V)\chi_{R_0}(\mathcal{P})$. Nach Integration über V reduziert sich die

Doppelsumme auf folgende einfache Summe für den Zähler in (12.116),

$$e^{-\beta V} \sum_R \left(\frac{c_R}{d_R} \right)^V \int d\mathcal{P} \chi_{R_0}(\mathcal{P}) \chi_R(\mathcal{P}) \chi_R(\mathcal{P}^{-1}).$$

Speziell für die einfachste nicht-Abelsche Eichgruppe $SU(2)$ mit Charakteren χ_j ergibt sich mit Hilfe der Clebsch-Gordon Zerlegung $\chi_j \chi_{j'} = \chi_{j+j'} + \dots + \chi_{|j-j'|}$ folgende Formel für die verbleibenden Gruppenintegrale,

$$\int d\mathcal{P} \chi_j(\mathcal{P}) \chi_{j'}(\mathcal{P}) \chi_{j'}(\mathcal{P}^{-1}) = \begin{cases} 0 & \text{für halbganzen } j \\ 1 & \text{für ganzes } j \text{ und } j' \geq j/2. \end{cases}$$

Für Darstellungen mit halbganzen Spin verschwindet also der Erwartungswert von $\chi_j(\mathcal{P})$ und für ganzzahlige Spins erhalten wir

$$\langle \chi_j(\mathcal{P}) \rangle = \frac{\sum_{n \geq 1} I_{j+n}^V(\beta)}{\sum_{n \geq 1} I_n^V(\beta)} \quad \text{für } j \in \{0, 1, 2, \dots\}. \quad (12.124)$$

Die Erwartungswert von Polyakovloops in Darstellungen mit halbganzen Spins muss verschwinden, da ein nicht-verschwindender Erwartungswert die globale *Zentrums-symmetrie* verletzen würde. Wir kommen später auf diesen Punkt zurück.

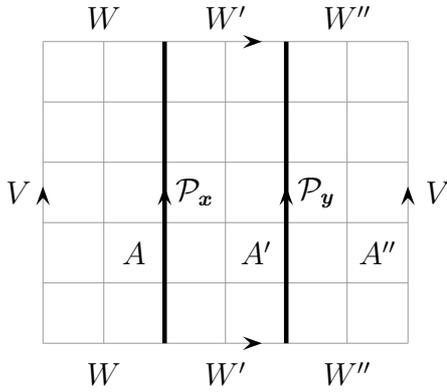
Für große Volumen dominieren die jeweils ersten Terme in den Summen und wir finden das asymptotische Verhalten

$$\langle \chi_j(\mathcal{P}) \rangle \approx \left(\frac{I_{j+1}(\beta)}{I_1(\beta)} \right)^V \quad \text{für } j \in \{0, 1, 2, \dots\}. \quad (12.125)$$

Da der Quotient der beiden Besselfunktionen für $j \neq 0$ kleiner als Eins ist, verschwindet der Erwartungswert im thermodynamischen Limes. Wir berechnen nun die Zweipunktfunktion

$$\langle \bar{\chi}_{R_0}(\mathcal{P}_x[u]) \chi_{R_0}(\mathcal{P}_y[U]) \rangle, \quad (12.126)$$

deren Logarithmus proportional zur Zunahme der freien Energie bei der Einbringung eines statischen Quark bei y und eines statischen Antiquarks bei x , beide in der Darstellung R_0 , ist.



Dazu teilt man das Gitter wie in der nebenstehenden Figur in drei Gebiete A , A' , A'' auf: eine Fläche zwischen den Schleifen und je eine zwischen einer Schleife und dem 'Gitterrand'. Verleimt man in jedem Gebiet die aufgrund der thermischen Randbedingungen zu identifizierenden Kantenvariablen, also die W , W' und W'' , so ergibt sich für den Zähler der Erwartungswertes eine dreifache Summe. Nach Integration über V fällt eine Summe weg und es verbleibt

$$e^{-\beta V} \sum_{R, R'} \left(\frac{c_R}{d_R} \right)^{A+A'} \left(\frac{c_{R'}}{d_{R'}} \right)^{A'} \chi_R(\mathcal{P}_x) \bar{\chi}_{R_0}(\mathcal{P}_x) \bar{\chi}_{R'}(\mathcal{P}_x) \chi_{R'}(\mathcal{P}_y) \chi_{R_0}(\mathcal{P}_y) \bar{\chi}_R(\mathcal{P}_y).$$

Die Integration über \mathcal{P}_y (oder die Integration über \mathcal{P}_x) zählt, wie oft die Darstellung R im Tensorprodukt $R_0 \otimes R'$ auftritt. Auf der rechten Seite treten nach Integration über die Polyakovschleifen die Betragsquadrate dieser verallgemeinerten Clebsch-Gordon Koeffizienten auf. Für die Eichgruppe $SU(2)$ und die fundamentale Darstellung findet man

$$\langle \text{tr } \mathcal{P}_x \text{tr } \mathcal{P}_y \rangle = \frac{e^{\beta V}}{Z} \left(\frac{2}{\beta} \right)^V \sum_{n \geq 1} \left(I_n^{A+A''}(\beta) I_{n+1}^{A'} + I_n^{A'}(\beta) I_{n+1}^{A+A''}(\beta) \right), \quad (12.127)$$

mit der Zustandssumme (12.123). Im thermodynamischen Grenzfall streben A und A'' beide gegen Unendlich und nur der Term proportional zu $I_1^{A+A''}$ in der Summe trägt bei. Mit $V = A + A' + A''$ findet man dann

$$\langle \text{tr } \mathcal{P}_x \text{tr } \mathcal{P}_y \rangle = \left(\frac{I_2(\beta)}{I_1(\beta)} \right)^{A'}. \quad (12.128)$$

Die freie Energie eines Quark-Antiquark Paares in der *fundamentalen Darstellung* von $SU(2)$ ist wegen $A' = |\mathbf{x} - \mathbf{y}|/T$ eine lineare Funktion des Abstands des Paares,

$$f(|\mathbf{x} - \mathbf{y}|) = \sigma |\mathbf{x} - \mathbf{y}|, \quad \text{mit} \quad \sigma_{1/2} = -\log \left(\frac{I_2(\beta)}{I_1(\beta)} \right). \quad (12.129)$$

Tatsächlich ist die freie Energie für eine *beliebige Darstellung* von $SU(2)$ eine lineare

Funktion des Abstands mit Stringspannung als Steigung,

$$\sigma_j = -\log\left(\frac{I_{2j+1}(\beta)}{I_1(\beta)}\right) \longrightarrow \begin{cases} 2j(j+1)/\beta & \text{für } \beta \rightarrow \infty \\ 2j \log(2/\beta) & \text{für } \beta \rightarrow 0. \end{cases} \quad (12.130)$$

Für schwache Kopplungen ($\beta \rightarrow \infty$) ist die Stringspannung σ_j proportional zum Wert $j(j+1)$ des (quadratischen) Casimiroperators derjenigen Darstellung, nach der die statischen Quarks transformieren. Man nennt dieses Verhalten das *Casimir scaling*.

12.7 Starke Kopplung

Die Wilsonwirkung einer reinen Gittereichtheorie

$$S_{\text{eich}} = \beta \sum_p \text{tr} (\mathbb{1} - \Re U_p), \quad \beta = \frac{2}{Ne^2}, \quad (12.131)$$

hat mit der nackten Kopplung e nur einen freien Parameter. Die Theorie kann als *klassisches Spinsystem* mit inverser Temperatur β angesehen werden. Der Grenzfall starker Kopplung entspricht dann dem Hochtemperaturlimes. Wir werden nun sehen, dass das führende Verhalten des Erwartungswertes von Wilson-Schleifen,

$$\langle W[C] \rangle = \frac{1}{Z} \int d\mu[U] W[C], \quad Z = \int d\mu[U], \quad (12.132)$$

für starke Kopplungen durch ein Flächengesetz charakterisiert ist. Zum Beweis erinnern wir uns an folgende wesentlichen Eigenschaften des Haar-Maßes:

$$\int_{\mathcal{G}} dU = 1 \quad , \quad \int_{\mathcal{G}} dU U_{\alpha\beta} = 0 \quad , \quad \int_{\mathcal{G}} dU U_{\alpha\beta} U_{\gamma\delta}^\dagger = c \delta_{\alpha\delta} \delta_{\beta\gamma}. \quad (12.133)$$

Die erste Bedingung ist die Normierung des Haar-Maßes, die zweite Bedingung gilt sogar für jede nicht-triviale Darstellung der Gruppe und die letzte Gleichung ist die Orthogonalitätsrelation. Die Integrale

$$\int_{\mathcal{G}} dU U_{\alpha\beta} U_{\gamma\delta} \quad (12.134)$$

verschwinden, wenn U und \bar{U} inäquivalente Darstellungen sind. Also verschwinden sie zum Beispiel für $SU(N)$ mit $N > 3$, aber nicht für $SU(2)$, $SO(N)$ oder G_2 . Die Integrale für höherer Potenzen der Matrixelemente $U_{\alpha\beta}$ (und ihrer komplex konjugierten Elemente) sind schwieriger zu berechnen. Man macht dabei wieder Gebrauch von

der Charakterentwicklung.

Ähnlich wie bei der starken Kopplungsentwicklung für Spinmodelle entwickeln wir für große e das Boltzmann-Gewicht in (12.69) nach Potenzen von $\beta \sim 1/e^2$,

$$\kappa \exp \left(\beta \sum_p \text{tr} \mathfrak{R}U_p \right) = \kappa \prod_p (1 + \beta \text{tr} \mathfrak{R}U_p + O(\beta^2)).$$

Die Faktor $\kappa = \exp(-\beta N d_p)$, wobei d_p die Anzahl Plaketten zählt und $N = \text{tr} \mathbb{1}$ ist, hebt sich in Erwartungswerten weg und wird von jetzt an nicht mehr berücksichtigt. Wegen (12.133) hat die Entwicklung der Zustandssumme die Form

$$Z = 1 + O(\beta^2) = 1 + O(1/e^4). \tag{12.135}$$

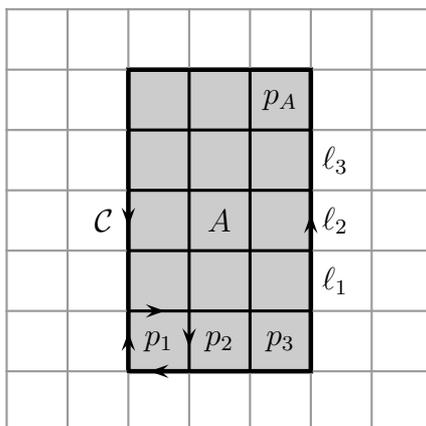
Für den Zähler im Erwartungswert (12.132) erhalten wir die Darstellung

$$\int \prod_{x,\mu} dU_\mu(x) \text{tr} \{U_{\ell_1} U_{\ell_2} \cdots U_{\ell_L}\} \prod_p (1 + f(\beta, U_p)) \tag{12.136}$$

mit der Klassenfunktion

$$f(\beta, U) = \frac{\beta}{2} \text{tr} (U + U^\dagger) + O(\beta^2). \tag{12.137}$$

In Gleichung (12.136) sind $\ell_i = (x_i, \mu_i)$ die L orientierten Gitterkanten der Schleife \mathcal{C} . Es gilt also $x_i + e_{\mu_i} = x_{i+1}$. Wegen der zweiten Eigenschaft in (12.133) verschwindet der erste Term der Entwicklung für jede Schleife \mathcal{C} die eine nicht-verschwindende Fläche einschließt. Der führende Term ist dadurch gegeben, dass im Integranden jede Linkvariable mindestens zweimal auftritt. Für Gruppen mit verschwindendem Integral (12.134) muss eine doppelt auftretende Linkvariable den Link in beide Orientierungen durchlaufen. Jedenfalls tragen nur Plakettenprodukte bei, die eine Fläche mit Rand $\partial\mathcal{C}$ definieren. Neben einer zusammenhängenden Fläche mit Rand $\partial\mathcal{C}$ kann das Plakettenprodukt noch weitere geschlossene Flächen definieren. Da jede Plakette einen Faktor β liefert, trägt in führender Ordnung die Fläche mit minimalen Inhalt bei. Der führende Beitrag zum Zähler, und damit zum



Erwartungswert (12.132) ist somit

$$\langle W[C] \rangle \sim \left(c^2 \frac{2}{Ng^2} \right)^A = \exp \left(-A \log \frac{Ng^2}{2c^2} \right), \quad (12.138)$$

wobei A die Anzahl Plaketten ist, welche die Minimalfläche A mit $\partial A = C$ aufspannen. Für eine rechteckige Wilson-Schleife ist $A = RT$. Die Konstante c kommt von den U -Integrationen und hängt von der Eichgruppe ab.

Bei der Berechnung von weiteren Termen in der starken-Kopplungsentwicklung ist folgende Bemerkung hilfreich: Wie bereits betont, tragen zum Zähler in (12.132) Plakettenprodukte bei, deren zugehörige Flächen den Rand C haben. Zusätzlich können geschlossene (also randlose) Flächen auftreten. Die Beiträge aller mit der von C berandeten Flächen nicht zusammenhängenden geschlossenen Flächen werden durch entsprechende Beträge im Nenner aufgehoben. Die Flächen mit Rand C können Selbstüberschneidungen haben oder von randlosen Flächen berührt werden. In jedem Fall erwartet man eine Darstellung der Form

$$\langle W[C] \rangle = \sum_{c_2; \partial c_2 = -C} e^{-\sigma A(c_2)}, \quad (12.139)$$

mit einer Stringspannung σ . Bisher ist es im Kontinuum leider noch nicht gelungen, eine vergleichbare Formel zu *beweisen*¹.

12.8 Gluebälle

In einer nicht-Abelschen Eichtheorie tragen auch die Austauschteilchen eine Ladung und wechselwirken untereinander. Daher erwartet man, dass sich auch gebundene Zustände in Abwesenheit von Materie bilden. In der Gluodynamics (reine $SU(3)$ Eichtheorie) nennt man diese gebundenen Zustände von Gluonen auch *Glueballs*. Gluebälle werden im Allgemeinen durch 3 Quantenzahlen charakterisiert: J^{PC} . Dabei bezeichnet J den Gesamtspin des Zustands, P und C stehen für das Transformationsverhalten des Zustands unter Paritätstransformation bzw. Ladungskonjugation. Als aus Spin-1 Teilchen zusammengesetzte Zustände haben die Gluebälle einen ganzzahligen Gesamtspin. Wir beschränken uns nun auf eine reine Eichtheorie und vernachlässigen die Wechselwirkung zwischen Gluonen und Quarks. Dies ist eine Näherung, denn zu den Bindungskräften zwischen Gluonen trägt auch der Austausch

¹OSTERWALDER und SEILER konnten beweisen, dass die starke Kopplungsentwicklung konvergiert, ganz im Gegensatz zur schwachen Kopplungsentwicklung. Nach einem Argument von Dyson ist diese im besten Fall asymptotisch.

von Quarks bei.

Die Energie von angeregten Zuständen kann aus dem Langzeitverhalten geeigneter Zweipunktsfunktionen extrahiert werden. Wir erinnern hier kurz an das entsprechende Argument. Es sei also $G(\tau)$ die zeitgeordnete (Euklidische) 2-Punktsfunktion zu einer Observablen, dargestellt durch den Operator \hat{O} . Dann ist

$$G_E(\tau) = \langle 0|T\hat{O}(\tau)\hat{O}(0)|0\rangle = \langle 0|\hat{O}e^{-H\tau}\hat{O}|0\rangle = \sum_n |\langle 0|\hat{O}|n\rangle|^2 e^{-E_n\tau}, \quad (12.140)$$

wobei $|n\rangle$ ein vollständiger Satz von Eigenzuständen des Hamiltonoperators mit Energien E_n ist. Für große Euklidische Zeiten ist

$$G_E(\tau) \longrightarrow |\langle 0|\hat{O}|0\rangle|^2 + |\langle 0|\hat{O}|1\rangle|^2 e^{-E_1\tau} (1 + \mathcal{O}(e^{-\tau(E_2-E_1)})). \quad (12.141)$$

Offensichtlich ist der niedrigste Energieeigenwert über dem Grundzustand, für den das Matrixelement $\langle 0|\hat{O}|1\rangle$ ungleich Null ist, für das asymptotische Verhalten der 2-Punktsfunktion verantwortlich. Das Matrixelement kann nur ungleich Null sein, wenn der Zustand $\hat{O}|0\rangle$ bezüglich aller Erhaltungsgrößen dieselben Quantenzahlen hat wie der Zustand $|1\rangle$. Durch geeignete Wahl des Operators \hat{O} kann man so einen durch seine Quantenzahlen charakterisierten Sektor herausfiltern. Insbesondere können die Massen der stabilen Zustände mit gegebenen Drehimpuls, Parität und Ladungszahl berechnet werden.

\hat{O} sollte eine eichinvarianter Operator sein, der im Rahmen der Euklidischen Funktionalintegralquantisierung, bzw. im Rahmen der Gittereichtheorie, durch eine entsprechende Funktion der Wilsonschleifen dargestellt wird. Sei O im Folgenden eine Summe von Wilsonschleifen,

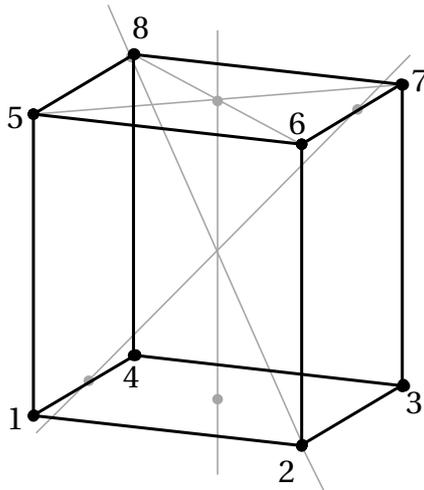
$$O = \sum \alpha_i W[\mathcal{C}_i] \quad \text{mit} \quad \langle O(\tau)O(0)\rangle = \sum_{i,j} \bar{\alpha}_i \alpha_j \langle W[\mathcal{C}_i^\tau]W[\mathcal{C}_j]\rangle. \quad (12.142)$$

Hier ist \mathcal{C}^τ die gegenüber \mathcal{C} um τ Gitterpunkte in Zeitrichtung verschobene Schleife. Die Schleifen selber können dabei auch Gitterlinien in zeitartiger Richtung besitzen. Oft wird jede Schleife noch über die gesamte raumartige Gitterebene verschoben und dann der räumliche Mittelwert genommen, wodurch Zustände zum Impuls 0 herausprojiziert werden.

Die mögliche Eigenwerte von Parität P und Ladungskonjugation C sind ± 1 . Die entsprechenden Projektionen lassen sich auf dem Gitter leicht implementieren. Bei den Drehungen ist das schwieriger da eine Gittertheorie nicht mehr invariant unter allen Raumdrehungen ist, sondern nur noch unter Drehungen die das Gitter in sich abbilden.

12.8.1 Die Würfelgruppe

Die Decktransformationen des Gitters mit Fixpunkt bilden eine endliche Untergruppe der Drehgruppe $SO(3)$. Für ein hyperkubisches Gitter ist dies (im räumlichen 3-dimensionalen Gitter) eine platonische Gruppe, nämlich die Decktransformationen des Würfels. Diese sind aus nebenstehender Abbildung ersichtlich. Der Würfel hat



drei Drehachsen vierter Ordnung durch die Mittelpunkte gegenüberliegender Flächen, sechs zweizählige Drehachsen durch die Mittelpunkte gegenüberliegender Kanten, sowie vier Drehachsen dritter Ordnung, die Raumdiagonalen. Die Ordnung der *Würfelgruppe* ist demnach

$$1 + \frac{F}{2} \times 3 + \frac{K}{2} \times 1 + \frac{E}{2} \times 2 = 24.$$

Sie ist isomorph zur Oktaedergruppe \mathcal{O}_{24} , die ihrerseits isomorph zur Permutationsgruppe S_4 ist, welche die 4 Raumdiagonalen des Würfels permutiert. Die Gruppenelemente wirken wie in der folgenden Tabelle angegeben.

Klasse	index	Rep.	$(x, y, z) \rightarrow$	Klasse	index	Rep.	$(x, y, z) \rightarrow$
e	1	a^4	(x, y, z)	c'_2	13	ba^2	$(-x, -z, -y)$
c_2	2	a^2	$(-x, -y, z)$	c'_2	14	ab^3a	$(-z, -y, -x)$
c_2	3	b^2a^2	$(-x, y, -z)$	c'_2	15	a^2b	$(-x, z, y)$
c_2	4	b^2	$(x, -y, -z)$	c'_2	16	b^2a	$(-y, -x, -z)$
c_3	5	ba	$(-y, -z, x)$	c'_2	17	aba	$(z, -y, x)$
c_3	6	b^2a^3b	$(-z, x, -y)$	c'_2	18	ab^2	$(y, x, -z)$
c_3	7	ab	(z, x, y)	c_4	19	a	$(-y, x, z)$
c_3	8	b^3a	$(-y, z, -x)$	c_4	20	a^3b^3a	$(z, y, -x)$
c_3	9	ba^3	$(y, -z, -x)$	c_4	21	b	$(x, -z, y)$
c_3	10	a^3b^3	$(z, -x, -y)$	c_4	22	a^3	$(y, -x, z)$
c_3	11	a^3b	$(-z, -x, y)$	c_4	23	a^3ba	$(-z, y, x)$
c_3	12	$abab$	(y, z, x)	c_4	24	b^3	$(x, z, -y)$

Die Gruppe besitzt 5 *Konjugationsklassen*: Die triviale Klasse e mit dem Einselement, die Klasse c_2 mit den π -Drehungen um die Achsen durch die Mittelpunkte gegenüberliegender Flächen, die Klasse c_3 mit den $2\pi/3$ Drehungen um die Raumdiagonalen, die Klasse c'_2 mit den π -Drehungen um die Achsen zwischen Mittelpunkten gegenüberliegender Kanten und die Klasse c_4 mit den sechs $\pi/2$ und $-\pi/2$ -Drehungen um die Achsen durch die Mittelpunkte gegenüberliegender Flächen.

Die Anzahl der irreduziblen Darstellungen einer endliche Gruppe ist gleich der Zahl ihrer Konjugationsklassen, und nach einem *Satz von Burnside* ist die Quadratsumme der Dimensionen dieser Darstellungen gleich der Ordnung der Gruppe. Die Würfelgruppe hat demnach 5 irreduzible Darstellungen und die Quadratsumme

Klasse	# El.	A_1	A_2	E	T_1	T_2
e	1	1	1	2	3	3
c_2	3	1	1	2	-1	-1
c_3	8	1	1	-1	0	0
c'_2	6	1	-1	0	1	-1
c_4	6	1	-1	0	-1	1

ihrer Dimensionen ist 24. Es sind dies die eindimensionale triviale Darstellung, manchmal mit A_1 bezeichnet, eine zweite eindimensionale Darstellung A_2 , eine zweidimensionale Darstellung E und zwei dreidimensionale Darstellungen T_1 und T_2 . Die Darstellung T_2 enthält die Decktransformationen des Würfels. Die nebenstehende Tabelle

enthält die Charakteren dieser 5 irreduziblen Darstellungen auf den 5 Konjugationsklassen e, c_2, c_3, c'_2 und c_4 .

Nun wollen wir aus einer gegebenen Wilsonschleife $W[\mathcal{C}]$ eine irreduzible Darstellung zu den Symmetrien P, C und $g \in \mathcal{O}_{24}$ konstruieren. Sei $\mathcal{C}_{a,P,g}$ die Schleife, die man aus \mathcal{C} durch Verschiebung um $a \in \mathbb{Z}_3$, Paritätstransformation $P \in \{1, -1\}$ und einer Gruppentransformation $g \in \mathcal{O}_{24}$ erhält. Dann ist

$$\mathcal{W}_{\theta^{PC}}[\mathcal{C}] = \sum_a \sum_{P,g} (-1)^P \chi_\theta(g) (W[\mathcal{C}_{a,P,g}] + (-)^C W^*[\mathcal{C}_{a,P,g}]) \tag{12.143}$$

ein Operator mit den Quantenzahlen θ^{PC} , zu verschwindendem räumlichen Impuls. Hierbei bezeichnet θ eine der fünf irreduziblen Darstellungen A_1, A_2, E, T_1 und T_2 der Würfelgruppe. Bei einfachen Schleifen mit gewissen Symmetrieeigenschaften wird $\mathcal{W}_{\theta^{PC}}[\mathcal{C}]$ für einige Darstellungen verschwinden.

Die unendlich vielen irreduziblen Darstellungen θ_ℓ der Drehgruppe $SO(3)$ werden durch den Drehimpuls $\ell = 0, 1, 2, \dots$ charakterisiert. Die $2\ell + 1$ -dimensionale Darstellung θ_ℓ zerfällt im Allgemeinen in mehrere irreduzible Darstellungen der Untergruppe \mathcal{O}_{24} . Die Verzweigungsregeln beschafft man sich mit Hilfe der Charakteren der der Decktransformationen des Würfels in den verschiedenen $SO(3)$ Darstellungen. In $SO(3)$ ist der Charakter $\chi_\ell(\phi)$ einer Drehung mit dem Winkel ϕ um eine belie-

bige Drehachse gleich

$$\chi_\ell(\phi) = 1 + 2 \sum_{k=1}^{\ell} \cos \phi. \quad (12.144)$$

Die Decktransformationen des Würfels sind Drehungen mit π , $2\pi/3$ und $\pi/2$, so dass

$$\begin{aligned} \chi_\ell(e) &= 2\ell + 1, \\ \chi_\ell(c_2) &= (-1)^\ell, \\ \chi_\ell(c_3) &= 1 - (\ell \bmod 3), \\ \chi_\ell(c'_2) &= (-1)^\ell, \\ \chi_\ell(c_4) &= 1 + (\ell \bmod 2) - (\ell \bmod 4). \end{aligned} \quad (12.145)$$

Bei der Bestimmung der Koeffizienten α_ℓ in den *Verzweigungsregeln*

$$\begin{aligned} \theta_\ell &= \alpha_\ell(A_1) A_1 \oplus \alpha_\ell(A_2) A_2 \oplus \alpha_\ell(E) E \oplus \alpha_\ell(T_1) T_1 \oplus \alpha_\ell(T_2) T_2 \\ \chi_\ell &= \alpha_\ell(A_1) \chi_{A_1} + \alpha_\ell(A_2) \chi_{A_2} + \alpha_\ell(E) \chi_E + \alpha_\ell(T_1) \chi_{T_1} + \alpha_\ell(T_2) \chi_{T_2} \end{aligned} \quad (12.146)$$

benutzt man, dass die fünf Charakteren von \mathcal{O}_{24} orthonormiert sind. Zum Beispiel ist

$$\alpha_\ell(A_2) = \frac{1}{24} \sum_{g \in \mathcal{O}_{24}} \chi_{A_2}(g) \chi_\ell(g),$$

wobei man bei der expliziten Berechnung ausnutzt, dass die Charakteren konstant sind auf den Konjugationsklassen. Die Charakteren für die fünf irreduziblen Darstellungen der Würfelgruppe findet man in der Tabelle auf Seite 272. Man erhält folgende Koeffizienten

$$\begin{aligned} 24\alpha_\ell(A_1) &= 2\ell + 15 + 9(-1)^\ell + 6(\ell \bmod 2) - 8(\ell \bmod 3) - 6(\ell \bmod 4), \\ 24\alpha_\ell(A_2) &= 2\ell + 3 - 3(-1)^\ell - 6(\ell \bmod 2) - 8(\ell \bmod 3) + 6(\ell \bmod 4), \\ 24\alpha_\ell(E) &= 4\ell - 6 + 6(-1)^\ell + 8(\ell \bmod 3), \\ 24\alpha_\ell(T_1) &= 6\ell - 3 + 3(-1)^\ell - 6(\ell \bmod 2) + 6(\ell \bmod 4), \\ 24\alpha_\ell(T_2) &= 6\ell + 9 - 9(-1)^\ell + 6(\ell \bmod 2) - 6(\ell \bmod 4), \end{aligned} \quad (12.147)$$

und nach Einsetzung in (12.146) die Regeln für die Verzweigung einer beliebigen Darstellung θ_ℓ der Drehgruppe in irreduzible Darstellungen der Würfelgruppe. Die folgende Tabelle enthält die expliziten Verzweigungsregeln für alle Darstellungen bis

zum Drehimpuls 15 [86, 87]:

	θ_0	θ_1	θ_2	θ_3	θ_4	θ_5	θ_6	θ_7	θ_8	θ_9	θ_{10}	θ_{11}	θ_{12}	θ_{13}	θ_{14}	θ_{15}
A_1	1	0	0	0	1	0	1	0	1	1	1	0	2	1	1	1
A_2	0	0	0	1	0	0	1	1	0	1	1	1	1	1	1	2
E	0	0	1	0	1	1	1	1	2	1	2	2	2	2	3	2
T_1	0	0	1	1	1	1	2	2	2	2	3	3	3	3	4	4
T_2	0	1	0	1	1	2	1	2	2	3	2	3	3	4	3	4

Wie erwartet, gehen θ_0 in A_1 und θ_1 in T_2 über. Aber schon die Darstellung θ_2 verzweigt in zwei Darstellungen, $\theta_2 = E \oplus T_1$. Wenn wir umgekehrt auf eine der fünf irreduziblen Darstellungen der Würfelgruppe projizieren, dann enthält der entsprechende Unterraum Zustände mit unterschiedlichen Drehimpulsen. Zum Beispiel tragen zur trivialen Darstellung A_1 die Drehimpulse $\ell = 0, 4, 6, 8, 9, \dots$ bei. Es ist deshalb nicht einfach, auf dem kubischen Gitter Darstellungen zu $\ell > 3$ herauszufiltern.

Beispiele für Operatoren zu bestimmten Quantenzahlen J^{PC} sind die folgenden:

$$\begin{aligned}
 \mathcal{W}_{0^{++}}[\mathcal{C}] &= \Re \quad \square \rightarrow + \text{parallelogramm} \rightarrow + \text{rhombus} \rightarrow \\
 \mathcal{W}_{1^{--}}[\mathcal{C}] &= \Im \quad \square \rightarrow \quad \begin{matrix} z \\ | \\ y \\ / \quad \backslash \\ x \end{matrix} \\
 \mathcal{W}_{2^{++}}[\mathcal{C}] &= \Re \quad \square \rightarrow - \text{parallelogramm} \rightarrow
 \end{aligned}$$

Eine Anwendbarkeit des beschriebenen Verfahrens hängt bei Simulationen von zwei weiteren Eigenschaften der Theorie ab. Einerseits sollte der nächst höhere Energieeigenwert (zu verschwindendem Impuls) E_2 viel größer als E_1 sein, worauf man allerdings wenig Einfluss hat. Andererseits sollte der Überlapp $\langle 0 | \hat{O} | 1 \rangle$ möglichst groß sein und hier kann man durch geschickte Wahl von \hat{O} eine Verbesserung erreichen. Sei nun \mathcal{W} eine Linearkombination von Operatoren zu festen Wilsonschleifen und Quantenzahlen,

$$\mathcal{W}_{\theta^{PC}} = \sum_{\mathcal{C}} \alpha(\mathcal{C}) \mathcal{W}_{\theta^{PC}}[\mathcal{C}] \quad \text{mit} \quad \sum_{\mathcal{C}} |\alpha(\mathcal{C})|^2 = 1. \tag{12.148}$$

In Simulationen werden α -Koeffizienten 'experimentell' ermittelt, so dass der Über-

lapp mit vertretbarem Aufwand vergrößert wird. Dabei wurden (nach Extrapolation zum Kontinuumslimit) folgende Werte für die leichtesten Gluebälle in physikalischen Einheiten (MeV) extrahiert [88]:

J^{PC}	0 ⁺⁺	2 ⁺⁺	0 ⁻⁺	1 ⁺⁻	2 ⁻⁺	3 ⁺⁻	3 ⁺⁺	1 ⁻⁻	2 ⁻⁻	3 ⁻⁻	2 ⁺⁻	0 ⁺⁻
m_G	1710	2390	2560	2980	3940	3600	3670	3830	4010	4200	4230	4780

Für die statistischen Fehler plus Fehlerabschätzungen für die angegebenen Kontinuumswerte (die Werte in der Tabelle sind für einen Sommerparameter von $r_0^{-1} = 410(20)$ notiert) verweise ich auf die Literatur.

12.9 Anhang C: Zur Berechnung des Haar-Maßes

In diesem Anhang werden wir eine explizite und konstruktive Formel für das Haar-Maß von kompakten Liegruppen angeben. Dabei machen wir Gebrauch von der Exponentialabbildung der Gruppe: Jedes Element U der n -dimensionalen Gruppe kann als Exponent eines Elementes T aus der Lie-Algebra geschrieben werden,

$$U = e^{iT} = e^{i(\alpha^1 T_1 + \dots + \alpha^n T_n)} = U(\alpha), \quad (\text{C.149})$$

wobei die T_1, \dots, T_n eine bezüglich der Spur orthogonale Basis der Lie-Algebra bilden,

$$\text{tr } T_a T_b = \kappa \delta_{ab}, \quad (\text{C.150})$$

und die Parameter $\{\alpha^1, \dots, \alpha^n\}$ Koordinaten der Lieschen Gruppe sind. Wir führen die einparametrische Gruppe

$$U(t) = e^{itT} \quad \text{mit} \quad U(0) = \mathbb{1}, \quad U(1) = U \quad (\text{C.151})$$

ein. Wir brauchen noch die n Lie-Algebra Elemente

$$L_a(t) = -i \frac{\partial U(t)}{\partial \alpha^a} U^{-1}(t).$$

Diese erfüllen die einfachen Differentialgleichungen

$$\frac{dL_a(t)}{dt} = T_a + i[T, L_a(t)]. \quad (\text{C.152})$$

Schreiben wir die L_a als Linearkombinationen der Basiselemente, $L_a = L_a^b T_b$, dann erfüllt die Koeffizientenmatrix $L = (L_a^b)$ die einfache Differentialgleichung

$$\dot{L}(t) = \mathbb{1} + L(t)X, \quad X = (X_a^b), \quad X_a^b = f_{ac}^b \alpha^c. \quad (\text{C.153})$$

In Matrix X ist anti-symmetrisch, da die Strukturkonstanten der Lie-Algebra

$$[T_a, T_b] = i f_{ab}^c T_c. \quad (\text{C.154})$$

reell und (für kompakte Gruppen) vollständig antisymmetrisch sind. Die Differentialgleichung (C.153) für die Matrixfunktion $L(t)$ hat als Lösung

$$L(t) = \int_0^t e^{(t-t')X} dt' = \frac{e^{tX} - \mathbb{1}}{X}. \quad (\text{C.155})$$

Nun können wir den in Gleichung (12.66) eingeführten invarianten metrischen Tensor berechnen,

$$g_{ab} = \text{tr} L_a L_b |_{t=1} = \kappa (LL^T)_{ab} |_{t=1}, \quad (\text{C.156})$$

wobei κ von der Normierung der Basiselemente (C.150) der Basiselemente herrührt. Bis auf über die Normierung zu bestimmenden multiplikativen Faktor folgt daraus die invariante Volumenform,

$$dV = \sqrt{g} \prod_a d\alpha^a \propto (\det LL^T)_{t=1}^{1/2} \prod_a d\alpha^a, \quad (\text{C.157})$$

die proportional zum Haar-Maß ist. Die dabei auftretende Matrix ist

$$\begin{aligned} LL^T |_{t=0} &= -\frac{1}{X^2} (e^X - \mathbb{1}) (e^{-X} - \mathbb{1}) = -4X^{-2} \sinh^2(X/2) \\ &= -\prod_{n \neq 0} (1 + X^2 / (2\pi n)^2), \end{aligned} \quad (\text{C.158})$$

wobei wir im letzten Schritt die Weierstraß'sche Produktdarstellung für die sinh-Funktion benutzen. Zum Beispiel finden wir für $SU(2)$ mit $T = \alpha^a \sigma_a$

$$X = \begin{pmatrix} 0 & -\alpha_3 & \alpha_2 \\ \alpha_3 & 0 & -\alpha_1 \\ -\alpha_2 & \alpha_1 & 0 \end{pmatrix} \quad \text{und} \quad dV \propto \frac{8}{|\alpha|^3} \sin^3 \left(\frac{|\alpha|}{2} \right) d^3 \alpha. \quad (\text{C.159})$$

Kapitel 13

Spinorfelder

Elektronen, Myonen oder Quarks werden 4-komponentige Spinorfelder $\psi(x) \in \mathbb{C}^4$ zugeordnet. Das Feld beschreibt neben Teilchen auch deren Antiteilchen mit gleicher Masse aber entgegengesetzter Ladung. Ohne Wechselwirkung gehorcht ψ der Diracgleichung

$$(i\gamma^\mu \partial_\mu - m)\psi(x) = 0, \quad \{\gamma^\mu, \gamma^\nu\} = 2\eta^{\mu\nu}\mathbb{1}, \quad (13.1)$$

wobei $(\eta^{\mu\nu})$ den metrischen Tensor $\text{diag}(1, -1, -1, -1)$ bezeichnet. Die Eigenschaften dieser relativistischen Bewegungsgleichung für Teilchen mit Spin 1/2 und insbesondere ihre Lösungen, die Transformationen der Spinoren bei einem Wechsel des Inertialsystems oder die Ankopplung von ψ an das elektromagnetische Feld sollen hier nicht wiederholt werden.

Beim Übergang zur euklidischen Theorie werden die γ^μ durch die euklidischen Gamma-Matrizen $\gamma_E^0 = \gamma^0$ und $\gamma_E^i = i\gamma^i$, welche die algebraischen Relationen

$$\{\gamma_E^\mu, \gamma_E^\nu\} = 2\delta^{\mu\nu} \quad (13.2)$$

erfüllen, ersetzt. Da im Folgenden nur die euklidische Theorie behandelt wird, lassen wir den Index E wieder weg. Die euklidischen Gamma-Matrizen sind hermitesch,

$$\gamma_\mu^\dagger = \gamma_\mu = \gamma^\mu \quad (13.3)$$

und die Diracgleichung für das Euklidische Feld lautet

$$D\psi(x) \equiv (\not{\partial} + m)\psi(x) = 0, \quad \not{\partial} = \gamma^\mu \partial_\mu. \quad (13.4)$$

In der euklidischen Raumzeit transformieren Spinoren mit unitären Spinmatrizen S unter Lorentz-Transformationen, d.h. $\psi(x') = S\psi(x)$ mit $S^\dagger S = \mathbb{1}$. Deshalb ist $\bar{\psi}\psi$

nicht invariant unter „euklidischen Lorentz-Transformationen“ wenn wir an der im Minkowski-Raum geltenden Beziehung $\bar{\psi} = \psi^\dagger \gamma^0$ festhalten. Im euklidischen Raum identifizieren wir $\bar{\psi}$ mit ψ^\dagger . Nur wenn $\bar{\psi}$ wie ψ^\dagger transformiert ist $\bar{\psi}\psi$ ein skalares Feld.

Der Operator $\not{\partial}$ ist anti-hermitesch, im Gegensatz zu m . Der Dirac-Operator D im euklidischen Raum ist noch „ γ_5 -hermitesch“

$$\gamma_5 D \gamma_5 = D^\dagger. \quad (13.5)$$

Mit dieser Bedingung erscheinen alle nicht-reellen Eigenwerte von D in komplex konjugierten Paaren. Man findet denselben nicht-hermiteschen Dirac-Operator auch bei einer sorgfältigen Ableitung der Pfadintegral-Darstellung für die thermische Zustandssumme [24]. Die obige Diracgleichung ist die Euler-Lagrange-Gleichung zur Wirkung

$$S_F = \int d^4x \left(\frac{1}{2} (\bar{\psi}(x) \gamma^\mu \partial_\mu \psi(x) - \partial_\mu \bar{\psi}(x) \gamma^\mu \psi(x)) + m \bar{\psi}(x) \psi(x) \right), \quad (13.6)$$

und bis auf einen Oberflächenterm ist diese gleich

$$S_F = \int d^4x \bar{\psi}(x) D \psi(x). \quad (13.7)$$

In dieser Form findet man die fermionische Wirkung auch in den meisten Lehrbüchern. Die Wirkung ist invariant unter den globalen $U(1)$ -Transformationen

$$\psi(x) \longrightarrow U \psi(x), \quad \bar{\psi}(x) \longrightarrow \bar{\psi}(x) U^{-1}, \quad U = e^{i\lambda}, \quad \lambda \in \mathbb{R}, \quad (13.8)$$

und diese Symmetrie kann durch Einführung eines Eichfeldes lokal gemacht werden. Im chiralen Limes $m = 0$ hat sie zusätzlich eine *chirale Symmetrie*,

$$\psi(x) \longrightarrow e^{\gamma_5 \alpha} \psi(x), \quad \bar{\psi}(x) \longrightarrow \bar{\psi}(x) e^{\alpha \gamma_5}, \quad \alpha \in \mathbb{R}. \quad (13.9)$$

Hier ist γ_5 die mit allen γ^μ antivertauschende und hermitesche Matrix

$$\gamma_5 = \gamma^0 \gamma^1 \gamma^2 \gamma^3 = \gamma_5^\dagger, \quad \{\gamma_5, \gamma^\mu\} = 0. \quad (13.10)$$

Man beachte, dass im euklidischen Raum die chiralen Transformationen die *nicht-kompakte* Gruppe \mathbb{R} bilden, im Gegensatz zur Situation in der Minkowski-Raumzeit, wo sie die kompakte Gruppe $U(1)$ bilden.

13.1 Grassmann Variablen

Wir kehren nochmals kurz zu den Skalarfeldern zurück. Klassische bosonische Felder sind gewöhnliche kommutierende Funktionen,

$$[\phi(x), \phi(y)] = 0, \quad (13.11)$$

und diese Eigenschaft kann als $\hbar \rightarrow 0$ Grenzfall der Kommutationsregeln für die Quantenfelder angesehen werden. Die Fermi-Statistik impliziert, dass fermionische Quantenfelder zu gleichen Zeiten antikommutieren,

$$\{\psi(t, \mathbf{x}), \psi(t, \mathbf{y})\} = 0.$$

Dies motiviert die Betrachtung eines klassischen Grenzfalles, in dem die Fermi-Felder antikommutieren,

$$\{\psi(x), \psi(y)\} = 0, \quad \forall x, y. \quad (13.12)$$

Es ist deshalb naheliegend, „klassische Fermi-Felder“ als antikommutierende Variablen, sogenannte Grassmann-Variablen, anzusehen. Dieses heuristische Argument kann im Rahmen der Pfadintegral-Darstellung für fermionischen Systeme gezeigt werden. Hier verweise ich auf die Literatur [17, 24].

Ein komplexe Grassmann-Algebra wird von Elementen η_i und $\bar{\eta}_i$ aufgespannt, die

$$\{\eta_i, \eta_j\} = \{\bar{\eta}_i, \bar{\eta}_j\} = \{\eta_i, \bar{\eta}_j\} = 0 \quad (13.13)$$

erfüllen. Eine Integration über Grassmann Variablen hat die Eigenschaft

$$\int d\eta_i (a + b\eta_i) = b \quad (13.14)$$

für beliebige komplexe Zahlen a, b . In der Quantenfeldtheorie treten oft Gauß'sche Integrale der Form

$$Z = \int \mathcal{D}\bar{\eta}\mathcal{D}\eta e^{-\bar{\eta}A\eta}, \quad \bar{\eta}A\eta = \sum_{ij} \bar{\eta}_i A_{ij} \eta_j \quad (13.15)$$

auf, wobei über alle Grassmann-Variablen integriert wird

$$\mathcal{D}\bar{\eta}\mathcal{D}\eta = \prod d\bar{\eta}_i d\eta_i. \quad (13.16)$$

Zur Berechnung des Integrals (13.15) entwickeln wir die Exponentialfunktion. Der einzige nichtverschwindende Beitrag ist

$$\begin{aligned} \frac{(-1)^n}{n!} \int \mathcal{D}\bar{\eta} \mathcal{D}\eta (\bar{\eta} A \eta)^n &= (-1)^n \int \mathcal{D}\bar{\eta} \mathcal{D}\eta \sum_{i_1, \dots, i_n} (\bar{\eta}_1 A_{1i_1} \eta_{i_1}) \cdots (\bar{\eta}_n A_{ni_n} \eta_{i_n}) \\ &= (-1)^n \int \mathcal{D}\bar{\eta} \mathcal{D}\eta \prod_i (\bar{\eta}_i \eta_i) \sum_{i_1, \dots, i_n} \epsilon_{i_1 \dots i_n} A_{1i_1} \cdots A_{ni_n} \\ &= \int \prod_i (d\bar{\eta}_i \bar{\eta}_i d\eta_i \eta_i) \det A = \det A \end{aligned}$$

und wir finden die einfache Formel

$$Z = \int \mathcal{D}\bar{\eta} \mathcal{D}\eta e^{-\bar{\eta} A \eta} = \det A \quad (13.17)$$

Nun betrachten wir ein allgemeines Gauß'sches Integral der Form

$$Z(\bar{\alpha}, \alpha) = \int \mathcal{D}\bar{\eta} \mathcal{D}\eta e^{-\bar{\eta} A \eta + \bar{\alpha} \eta + \bar{\eta} \alpha}, \quad (13.18)$$

wobei die Quellen $\alpha = (\alpha_1, \dots, \alpha_n)$ und $\bar{\alpha} = (\bar{\alpha}_1, \dots, \bar{\alpha}_n)$ zwei Tupel von Grassmannwertigen Variablen sind und $\bar{\eta} \alpha = \sum \bar{\alpha}_i \eta_i$ bezeichnet. Verschieben wir die Integrationsvariablen $\bar{\eta}_i$ und η_i gemäß

$$\eta \rightarrow \eta + A^{-1} \alpha \quad \text{und} \quad \bar{\eta} \rightarrow \bar{\eta} + \bar{\alpha} A^{-1}$$

und berücksichtigen die Translationsinvarianz der Grassmann-Integration, dann finden wir folgende Verallgemeinerung von (13.17)

$$Z(\bar{\alpha}, \alpha) = \int \mathcal{D}\bar{\eta} \mathcal{D}\eta e^{-\bar{\eta} A \eta + \bar{\alpha} \eta + \bar{\eta} \alpha} = e^{\bar{\alpha} A^{-1} \alpha} \det A. \quad (13.19)$$

Entwickelt man beide Seiten in Potenzen von $\bar{\alpha}$ und α dann gewinnen wir insbesondere die nützliche Formel

$$\langle \bar{\eta}_i \eta_j \rangle \equiv \frac{1}{Z} \int \mathcal{D}\bar{\eta} \mathcal{D}\eta e^{-\bar{\eta} A \eta} \bar{\eta}_i \eta_j = (A^{-1})_{ij}. \quad (13.20)$$

Die Erwartungswerte von Produkten mit einer ungleichen Anzahl $\bar{\eta}$ und η verschwinden,

$$\langle \bar{\eta}_{i_1} \cdots \bar{\eta}_{i_n} \eta_{j_1} \cdots \eta_{j_m} \rangle = 0 \quad \text{für} \quad m \neq n. \quad (13.21)$$

Nach diesen algebraischen Vorbetrachtungen kehren wir zur Feldtheorie zurück. Fermionische Felder ordnen jedem Raumzeit-Punkt Grassmann-Variablen zu. Für ein Dirac-Feld in 4 Dimensionen sind dies die 8 antikommutierende Variablen $\psi_\alpha(x), \bar{\psi}_\alpha(x)$, da der Spinorindex α die Werte 1, 2, 3, 4 annimmt. Das „klassische“ Dirac-Feld erfüllt

$$\{\psi_\alpha(x), \psi_\beta(y)\} = \{\bar{\psi}_\alpha(x), \bar{\psi}_\beta(y)\} = \{\psi_\alpha(x), \bar{\psi}_\beta(y)\} = 0. \quad (13.22)$$

Im fermionischen Pfadintegral wird über fermionische und anti-fermionische Feldkonfigurationen integriert. Wir schreiben kurz

$$\mathcal{D}\psi\mathcal{D}\bar{\psi} \equiv \prod_x \prod_\alpha d\psi_\alpha(x) d\bar{\psi}_\alpha(x). \quad (13.23)$$

Eine fermionische Greenfunktion ist durch ein Funktionalintegral gegeben,

$$\langle 0|\hat{A}|0\rangle = \frac{1}{Z_F} \int \mathcal{D}\psi\mathcal{D}\bar{\psi} A e^{S_F}, \quad \text{mit} \quad Z_F = \int \mathcal{D}\psi\mathcal{D}\bar{\psi} e^{S_F}, \quad (13.24)$$

und Wirkung S_F für die Fermionen. Für das freie Dirac-Feld ist

$$S_F = \int d^d x \bar{\psi}(x) D\psi(x). \quad (13.25)$$

In fast allen physikalisch interessanten Theorien ist S_F bilinear in den fermionischen Feldern¹. Mit den Regeln für Grassmann-Integrale folgt, dass für bilineare Wirkungen das Funktionalintegral formal einfach zu berechnen ist,

$$Z_F = \int \mathcal{D}\psi\mathcal{D}\bar{\psi} \exp\left(\int d^d x \bar{\psi}(x) D\psi(x)\right) = \det D. \quad (13.26)$$

Dies ist die allgegenwärtige fermionische Determinante in Feldtheorien mit Fermionen, zum Beispiel im Standardmodell der Teilchenphysik oder vielen supersymmetrischen Feldtheorien. Die entsprechende Formel für komplexe Skalarfelder lautet

$$\int \mathcal{D}\phi\mathcal{D}\bar{\phi} e^{-\int d^d x \bar{\phi}(x) A\phi(x)} = \frac{1}{\det A}. \quad (13.27)$$

Man erhält die inverse Determinante. Formuliert man die Theorie auf einem Raumzeitgitter, dann ist man mit der Berechnung der Determinante oder dem Inversen der typisch riesigen Matrix D konfrontiert.

¹Ausnahmen sind *Thirring-, Gross-Neveu- oder Supergravitations-Modelle*.

13.2 Spinorfelder auf dem Gitter

Im Folgenden sollen Gitterversionen für Theorien der Spin-1/2 Felder konstruiert werden. Man findet auf natürliche Art eine Gitterversion der Kontinuumswirkung, wenn man Differentiale durch Differenzen ersetzt. Alle Längen und Parameter werden in Einheiten der Gitterlänge a gemessen. Es bezeichne e_μ den Vektor in Richtung μ .

13.2.1 Gitterableitungen

Die Wahl der Diskretisierung von Differentialoperatoren ist für Theorien mit Fermionen ein delikates Problem, da die Feldgleichungen Differentialoperatoren erster Ordnung enthalten. Für einen Operator D erster Ordnung D hängt die Greenfunktion

$$S_D(x-y) = \langle x | \frac{1}{D} | y \rangle \quad (13.28)$$

auch für sehr grosse Gitter von der gewählten Diskretisierung ab.

Vorwärts- und Rückwärtsableitung

Die oft gebrauchten nächste-Nachbarn Vorwärts- und Rückwärtsableitungen

$$(\partial_\mu f)(x) = f(x + e_\mu) - f(x) \quad , \quad (\partial_\mu^* f)(x) = f(x) - f(x - e_\mu) \quad (13.29)$$

auf dem Gitter mit Gitterkonstanten a sind zwar nicht hermitesch bezüglich des Skalarproduktes $(f, g) = \sum_{x \in \Lambda} \bar{f}(x)g(x)$, aber es gilt für periodische Randbedingungen

$$(f, \partial_\mu g) = -(\partial_\mu^* f, g). \quad (13.30)$$

Die Ableitungen definieren *zirkulante Matrizen*, d.h. spezielle Toeplitz-Matrizen, bei denen jeder Zeilenvektor relativ zum darüberliegenden Zeilenvektor um einen Eintrag nach rechts verschoben ist, und zirkulante Matrizen vertauschen miteinander,

$$[\partial_\mu, \partial_\nu] = [\partial_\mu^*, \partial_\nu^*] = [\partial_\mu, \partial_\nu^*] = 0. \quad (13.31)$$

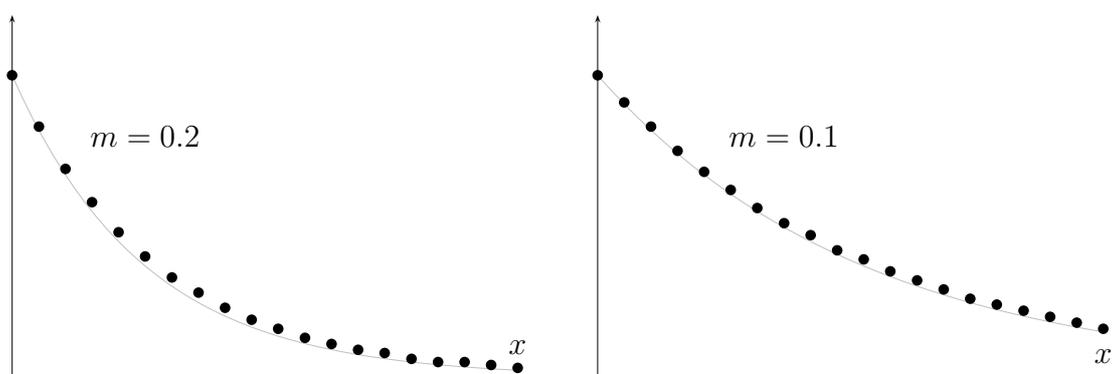
Die φ_p in (5.69) sind gleichzeitig Eigenfunktionen aller Ableitungsoperatoren,

$$\partial_\mu \varphi_p = i\hat{p}_\mu e^{ip_\mu/2} \varphi_p \quad \text{und} \quad \partial_\mu^* \varphi_p = i\hat{p}_\mu e^{-ip_\mu/2} \varphi_p, \quad \hat{p}_\mu = 2 \sin \frac{p_\mu}{2}. \quad (13.32)$$

Deshalb hat die Greenfunktion von $\partial + m$ auf dem *eindimensionalen* Gitter die Form

$$\langle x | \frac{1}{\partial + m} | 0 \rangle = \frac{1}{N} \sum_p \frac{e^{ipx}}{m + ie^{ip/2} \hat{p}} \xrightarrow{N \rightarrow \infty} \frac{1}{2\pi} \int_{-\pi}^{\pi} dp \frac{e^{ipx}}{m + ie^{ip/2} \hat{p}}. \quad (13.33)$$

Der reelle Propagator wird für Korrelationslängen $\xi > 5$ oder Massen $m < 0.2$ auf dem ganzen Gitter durch die Exponentialfunktion gut gefittet. In der folgenden Abbildung ist er für 20 Gitterpunkte geplottet.



Antisymmetrische Ableitung

Anstelle der Links- und Rechtsableitungen wird auch die *antisymmetrische* Diskretisierung von ∂_μ benutzt,

$$\partial_\mu^A = \frac{1}{2} (\partial_\mu + \partial_\mu^*) \implies (\partial_\mu^A f)(x) = \frac{1}{2} (f(x + e_\mu) - f(x - e_\mu)). \quad (13.34)$$

Diese *naive Gitterableitung* ist antisymmetrisch und ihre Komponenten kommutieren,

$$(f, \partial_\mu^A g) = -(\partial_\mu^A f, g) \quad \text{und} \quad [\partial_\mu^A, \partial_\nu^A] = 0. \quad (13.35)$$

Die ∂_μ^A können also gleichzeitig diagonalisiert werden und die ebenen Wellen

$$\varphi_p = \frac{1}{\sqrt{V}} e^{ipx}, \quad p_\mu = \frac{2\pi}{N} n_\mu, \quad n_\mu \in \mathbb{Z}_N \quad (13.36)$$

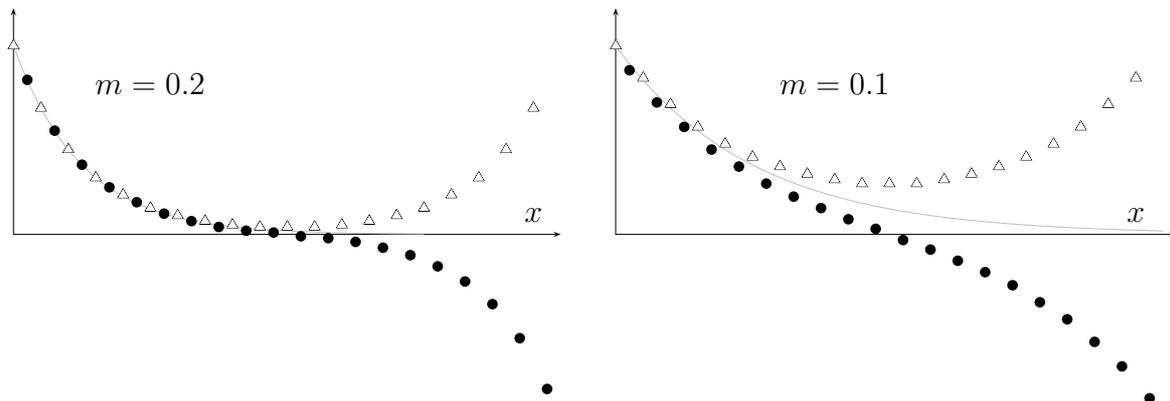
sind ihre Eigenfunktionen,

$$\partial_\mu^A \varphi_p(x) = i\mathring{p}_\mu \varphi_p(x), \quad \mathring{p}_\mu = \sin p_\mu. \tag{13.37}$$

Auf dem eindimensionalen Gitter findet man die Greenfunktion

$$\langle x | \frac{1}{\partial^A + m} | 0 \rangle = \frac{1}{N} \sum_p \frac{e^{ipx}}{m + i\mathring{p}} \xrightarrow{N \rightarrow \infty} \frac{1}{2\pi} \int_{-\pi}^{\pi} \frac{e^{ipx}}{m + i\mathring{p}} \tag{13.38}$$

Für ein Gitter mit 40 Punkten ist der Propagator für zwei Massen in den beiden folgenden Abbildungen gezeigt. Eingeschränkt auf die (un)geraden Gitterpunkte definiert er eine (un)gerade Gitterfunktion. Für $x \rightarrow 0$ nähern sich die beiden Funktionen, während sie für $x \rightarrow N$ entgegengesetztes Vorzeichen haben. Als Folge oszilliert der Propagator für $x \rightarrow N$ mit grosser Amplitude um den Wert 0.



Für $x \ll N$ und $5 \ll \xi \ll N/2$ approximiert die ebenfalls geplottete Exponentialfunktion $\exp(-mx)$ die Greenfunktion sehr gut.

Slac-Ableitung

Die Einführung dieser interessanten Gitterableitung benötigt etwas mehr Vorarbeit. Wir führen äquidistanten Stützstellen auf einem eindimensionalen Gitter mit N Gitterpunkten²

$$x_k = x_0 + k, \quad k = 1, \dots, N, \tag{13.39}$$

²Wir folgen hier teilweise der Vorlesung *Computational Physics I* von U. Wolf.

ein und wählen periodische Randbedingungen, d.h. x_k und x_{N+k} werden identifiziert. Die Menge der Gitterfunktionen $x_k \rightarrow \psi_k \in \mathbb{C}$, versehen mit dem Skalarprodukt,

$$(\phi, \psi) = \sum_{k=1}^N \bar{\phi}_k \psi_k, \quad (13.40)$$

definieren den Hilbertraum \mathbb{C}^N . Eine Gitterfunktion kann als Wellenfunktion eines Punktteilchens auf dem Gitter aufgefasst werden. Für ein auf Eins normiertes ψ interpretieren wir $|\psi_k|^2$ als Wahrscheinlichkeit dafür, das Teilchen am Gitterpunkt x_k zu finden. Entsprechend ist der Erwartungswert des Ortsoperators

$$\langle \hat{x} \rangle_\psi = \langle \bar{\psi} | \hat{x} | \psi \rangle = \sum x_k |\psi_k|^2 \equiv \sum_{kk'} \bar{\psi}_k x_{kk'} \psi_{k'}. \quad (13.41)$$

Wie erwartet ist der Ortsoperator in der Ortsdarstellung diagonal,

$$x_{kk'} = x_k \delta_{kk'}, \quad (13.42)$$

und die Matrixelemente von \hat{x} verschwinden für $k \neq k'$. Um zu einer Darstellung des Impulsoperators zu gelangen, wechseln mit Hilfe der diskreten Fourier-Transformation in den Impulsraum mit Wellenfunktionen $\tilde{\psi}(p_\ell) \equiv \tilde{\psi}_\ell$ wie folgt

$$\tilde{\psi}_\ell = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{k=1}^N e^{-ip_\ell x_k} \psi_k, \quad p_\ell = \frac{2\pi}{N} (\ell - \alpha), \quad \ell = 1, 2, \dots, N. \quad (13.43)$$

Die Verschiebung α wird später so gewählt, dass die Eigenwerte des Impulsoperators in Paaren $(p, -p)$ auftreten. Für periodische Felder muss α eine ganze Zahl sein. Die Rücktransformation lautet

$$\psi_k = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\ell=1}^N e^{ip_\ell x_k} \tilde{\psi}_\ell, \quad k = 1, 2, \dots, N. \quad (13.44)$$

Mit ψ ist auch $\tilde{\psi}$ auf Eins normiert und wir können $|\tilde{\psi}_\ell|^2$ als Wahrscheinlichkeit für das Auftreten des Impulses p_ℓ interpretieren. Dann ergibt sich für den Mittelwert von $f(p)$

$$\begin{aligned} \langle f(\hat{p}) \rangle_\psi &= \sum_{\ell} f(p_\ell) |\tilde{\psi}_\ell|^2 = \frac{1}{N} \sum_{\ell} \sum_{kk'} e^{ip_\ell (x_k - x_{k'})} f(p_\ell) \bar{\psi}_k \psi_{k'} \\ &= \sum_{kk'} \bar{\psi}_k f(p)_{kk'} \psi_{k'}, \quad f(p)_{kk'} = \frac{1}{N} \sum_{\ell} e^{ip_\ell (x_k - x_{k'})} f(p_\ell). \end{aligned} \quad (13.45)$$

Wie erwartet hat der Operator $f(p)$ in der Ortsdarstellung nicht-diagonale Matrixelemente $f(p)_{kk'}$. Mit Hilfe der erzeugenden Funktion

$$Z(x) = \frac{1}{N} \sum_{\ell=1}^N e^{iN p_{\ell} x} = e^{i\pi\beta x} \frac{\sin \pi N x}{N \sin \pi x}, \quad \beta = 1 + N - 2\alpha, \quad (13.46)$$

erhält man die Matrixelemente von $f(\hat{p})$ durch Ableiten nach x ,

$$f(p)_{kk'} = f\left(\frac{1}{iN} \frac{d}{dx}\right) Z(x) \Big|_{x=(k-k')/N} \quad (13.47)$$

Man findet für den Impulsoperator

$$p_{kk} = \frac{\pi\beta}{N}, \quad p_{k \neq k'} = \frac{\pi}{iN} (-)^{k-k'} \frac{e^{i\beta t_{kk'}}}{\sin t_{kk'}}, \quad t_{kk'} = \pi \frac{(k-k')}{N}. \quad (13.48)$$

Wählen wir $2\alpha = 1 + N$, dann verschwindet β und das Impulsspektrum liegt symmetrisch zum Ursprung. Für eine ungerade Anzahl Gitterpunkte entspricht dies *periodischen* und für eine gerade Anzahl Gitterpunkten *antiperiodischen Randbedingungen*. Die Matrixelemente des Impulsoperators sind reell und haben die einfache Form

$$p_{kk} = 0, \quad p_{k \neq k'} = \frac{\pi}{iN} (-)^{k-k'} \frac{1}{\sin t_{kk'}} \quad (\beta = 0), \quad (13.49)$$

Die Wahl $2\alpha = N$ oder $\beta = 1$ entspricht periodischen Randbedingungen für gerades N und antiperiodischen Randbedingungen für ungerades N . Das Spektrum des Impulses ist nicht symmetrisch zum Ursprung und die Matrixelemente sind komplex

$$p_{kk} = \frac{\pi}{N}, \quad p_{k \neq k'} = \frac{\pi}{iN} (-)^{k-k'} \frac{e^{it_{kk'}}}{\sin t_{kk'}} \quad (\beta = 1). \quad (13.50)$$

In der folgenden Abbildung sind die Greenfunktionen

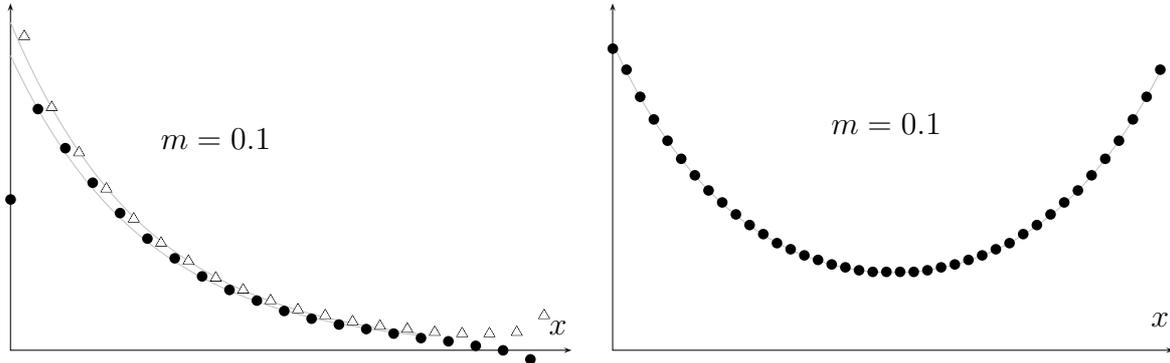
$$\langle x | \frac{1}{m + \partial_{\text{slac}}} | 0 \rangle \quad \text{und} \quad \langle x | \frac{1}{m^2 - \partial_{\text{slac}}^2} | 0 \rangle, \quad (\partial_{\text{slac}})_{kk'} = ip_{kk'}, \quad (13.51)$$

geplottet. Wir beobachten hier das bekannte *Gibbs-Phenomen*, da in der Nähe der Sprungstelle bei $x = 0$ die Amplitude der Greenfunktion ausschlägt. Deshalb wurden die beiden exponentiellen Fitfunktionen mit Masse m so normiert, dass sie für $x = 2$ beziehungsweise für $x = 3$ mit dem Propagator übereinstimmen. Der Propagator von

$m^2 + \partial_{\text{slac}}^2$ wird mit

$$\langle x | \frac{1}{m^2 - \partial_{\text{slac}}^2} | 0 \rangle \sim \text{const} (e^{-mx} + e^{-m(N-x)})$$

sehr gut gefittet. Die Werte sind für ein Gitter mit 41 Punkten berechnet.



13.2.2 Naive Fermionen auf dem Gitter

Im Folgenden diskutieren wir mehrere Vorschläge, wie man Fermionen auf ein Raumzeit-Gitter „setzen“ kann. Ersetzen wir die Kontinuumsableitung ∂_μ (13.6) durch die Vorwärts- oder Rückwärtsableitung auf dem Gitter, dann finden wir folgende Wirkung für *Dirac-Spinoren* auf dem endlichen Raumzeitgitter,

$$S_{n,F} = \sum_x \bar{\psi}(x) (\mathring{D}\psi)(x), \quad \mathring{D} = \gamma^\mu \partial_\mu^A + m. \tag{13.52}$$

Mit der antisymmetrischen Ableitung (13.34) hat man allerdings ein Verdopplungsproblem. Um dies einzusehen, berechnen wir das Spektrum und die Eigenfunktionen von $\gamma^\mu \partial_\mu^A$ und die Zweipunktfunktion

$$\langle \psi(x) \bar{\psi}(y) \rangle = S(x, y) = \langle x | \frac{1}{\mathring{D}} | y \rangle. \tag{13.53}$$

Der nicht-negative Laplace-Operator $\mathring{\Delta} = \partial_\mu^A \partial_\mu^A$ in

$$\mathring{D} \mathring{D}^\dagger = (\gamma^\mu \partial_\mu^A + m)(-\gamma^\mu \partial_\mu^A + m) = (-\mathring{\Delta} + m^2) \mathbb{1} \tag{13.54}$$

verbindet nur übernächste Nachbarn,

$$(\mathring{\Delta} f)(x) = \frac{1}{4} \sum_\mu (f(x + 2e_\mu) - 2f(x) + f(x - 2e_\mu)) \tag{13.55}$$

und hat die Eigenwerte

$$\mathring{p}^2 \quad \text{mit} \quad \mathring{p}_\mu = \sin(p_\mu). \tag{13.56}$$

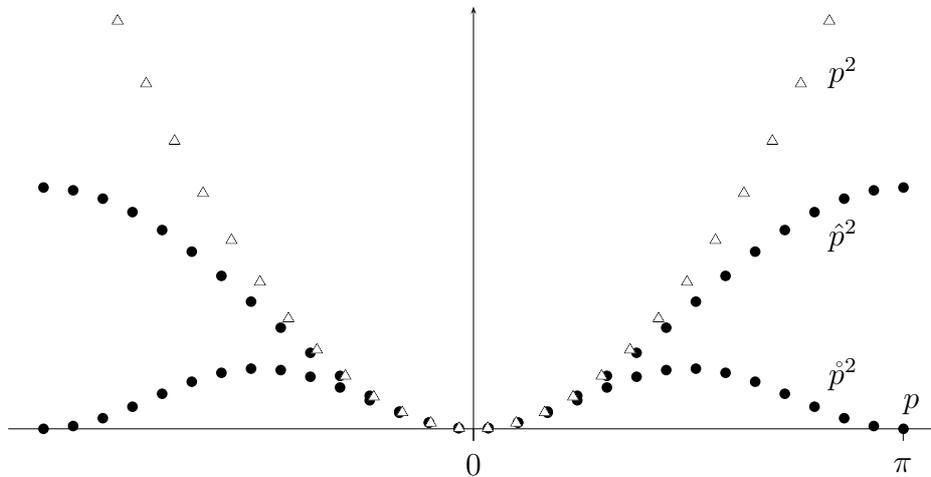
Genau diese Eigenschaft ist aber für das *Verdopplungsproblem* verantwortlich. Um dies zu sehen, sollte man mit der üblichen Diskretisierung des Laplace-Operators,

$$(\Delta f)(x) = (\partial_\mu^* \partial_\mu f)(x) = \sum_\mu (f(x + e_\mu) - 2f(x) + f(x - e_\mu)), \tag{13.57}$$

die nur nächste Nachbarn verbindet, vergleichen. Der Operator $-\Delta$ hat die Eigenwerte

$$\hat{p}^2 \quad \text{mit} \quad \hat{p}_\mu = 2 \sin\left(\frac{p_\mu}{2}\right). \tag{13.58}$$

In der folgenden Abbildung werden die Dispersionsrelationen (13.56,13.58) verglichen.



Ebenfalls gezeigt ist die Dispersionsrelation

$$p \longrightarrow p^2, \quad p \in \frac{2\pi}{N} \mathbb{Z}_N$$

des eindimensionalen Kontinuum-Operators auf dem Intervall der „Länge“ N . Für kleine p streben die Eigenwerte beider Gitteroperatoren gegen die Kontinuumswerte p^2 . Aber während Δ genauso wie der Kontinuumsoperator nur die konstante Nullmode hat, besitzt $\hat{\Delta}$ für gerades N genau 2^d Nullmoden. Diese haben die Form (5.69)

mit

$$p = (p_1, \dots, p_d) \quad \text{und} \quad p_\mu \in \{0, \pi\}. \quad (13.59)$$

Für ungerades N gibt es streng genommen nur eine Nullmode. Aber im thermodynamischen Limes hat die Dispersionsrelation (13.56) genau 2^d verschiedene Nullstellen in der ersten *Brilloinzone* $[0, 2\pi)^d$.

Jede Eigenfunktion φ_p von $\mathring{\Delta}$ definiert (in 4 Dimensionen) je zwei Eigenfunktionen des naiven Dirac-Operators \mathring{D} mit Eigenwerten

$$\mathring{\lambda}_p = m + i|\mathring{p}| \quad \text{und} \quad \mathring{\lambda}_p = m - i|\mathring{p}|. \quad (13.60)$$

Sind $\chi^{(1)}, \dots, \chi^{(4)}$ konstante Elemente im \mathbb{C}^4 , dann haben diese (unnormierten) Eigenfunktionen die Form

$$\psi_p^{(\alpha)} = (i|\mathring{p}| \pm \gamma^\mu \partial_\mu^A) \varphi_p(x) \chi^{(\alpha)} = i(|\mathring{p}| \pm \gamma^\mu \mathring{p}_\mu) \varphi_p(x) \chi^{(\alpha)}. \quad (13.61)$$

Hat $\psi_p^{(\alpha)}$ den Eigenwert $\mathring{\lambda}_p$, dann hat $\gamma_5 \psi_p^{(\alpha)}$ den komplex konjugierten Eigenwert. Die Eigenwerte des naiven Dirac-Operators \mathring{D} in (13.52) haben alle den gleichen Realteil,

$$\sigma(\mathring{D}) = \{m \pm i|\mathring{p}|\}. \quad (13.62)$$

Die Greenfunktion von $\mathring{D}\mathring{D}^\dagger$ hat die endliche Reihendarstellung

$$\langle x | \frac{1}{\mathring{D}\mathring{D}^\dagger} | y \rangle = \frac{\mathbb{1}_4}{V} \sum_p \frac{e^{ip(x-y)}}{\mathring{p}^2 + m^2}, \quad (13.63)$$

und entsprechend lautet die Zweipunktfunktion (13.53)

$$\langle x | \frac{1}{\mathring{D}} | y \rangle = \mathring{D}^\dagger \langle x | \frac{1}{\mathring{D}\mathring{D}^\dagger} | y \rangle = \frac{1}{V} \sum_p \frac{-i\gamma^\mu \mathring{p}_\mu + m}{\mathring{p}^2 + m^2} e^{ip(x-y)}. \quad (13.64)$$

Im thermodynamischen Limes wird die Summe über p zu einem Riemann-Integral über die erste Brilloinzone,

$$\langle x | \frac{1}{\mathring{D}} | y \rangle = \frac{1}{(2\pi)^d} \int_B d^d p \frac{\gamma^\mu \mathring{p}_\mu + m}{\mathring{p}^2 + m^2} e^{ip(x-y)} \quad (13.65)$$

Die naive Diskretisierung der Kontinuumstheorie führt zu einer Gittertheorie mit überzähligen Freiheitsgraden bei niedrigen Energien.

Eine zweite naive Diskretisierung beruht auf der Vorwärtsableitung

$$\hat{D} = \gamma^\mu \partial_\mu + m. \quad (13.66)$$

Diese Implementierung verletzt aber die hyperkubische Symmetrie. Diese Symmetrie wird aber gebraucht, um im Infraroten die $O(4)$ -Symmetrie wiederherzustellen. Weiterhin wird die Reflektions-Hermizität (das euklidische Gegenstück zur Hermizität in der Minkowski-Raumzeit) verletzt und die Theorie in der Minkowski-Raumzeit wird nicht unitär sein.

13.2.3 Wilson-Fermionen

Es gibt mehrere Auswege, diese Verdopplung der Fermionen zu verhindern. Die Vorschläge in [64] vermeiden die Verdopplung, verletzen aber die chirale Symmetrie für masselose Fermionen. Die auf der Slac-Ableitung beruhende Methode in [66] vermeidet ebenfalls das Verdopplungsproblem und respektiert darüberhinaus die chirale Symmetrie. Sie hat allerdings für an Eichfelder koppelnde Fermionen Probleme mit den Ward-Identitäten im schwachen Kopplungslimes und für kleine Gitterkonstanten [67].

Das Verdopplungsproblem war WILSON bereits in den Anfangsjahren der Gittertheorien bekannt. Er schlug eine modifizierte Wirkung für Fermionen vor, um die Verdopplung im Kontinuumslimes loszuwerden. Er addierte einen Term³ zur naiven Wirkung

$$S_{w,F} = S_{n,F} - \frac{r}{2} \sum_x \bar{\psi}(x) (a\Delta\psi)(x) = \sum_x \bar{\psi}(x) (D_w\psi)(x), \quad (13.67)$$

wobei der *Wilson-Parameter* r in

$$D_w = \hat{D} - \frac{ar}{2} \Delta \quad (13.68)$$

im Intervall $(0, 1]$ liegt. Der Operator D_w ist *normal*, $[D_w, D_w^\dagger] = 0$ und hat die Eigenwerte

$$\lambda_{w,p} = \left(m + \frac{ar}{2} \hat{p}^2 \right) \pm i|\hat{p}| \quad \text{mit} \quad \hat{p}_\mu = \frac{2}{a} \sin\left(\frac{ap_\mu}{2}\right), \quad \hat{p}_\mu = \frac{1}{a} \sin(ap_\mu) \quad (13.69)$$

Dabei treten jeweils beide Vorzeichen beim Wurzel ziehen auf. Wir nehmen vorerst an, die Gitterkonstante sei $a = 1$.

³Er wird heute *Wilson-Term* genannt.

Um die Lage der Eigenwerte in der komplexen Ebene zu berechnen, setzen wir

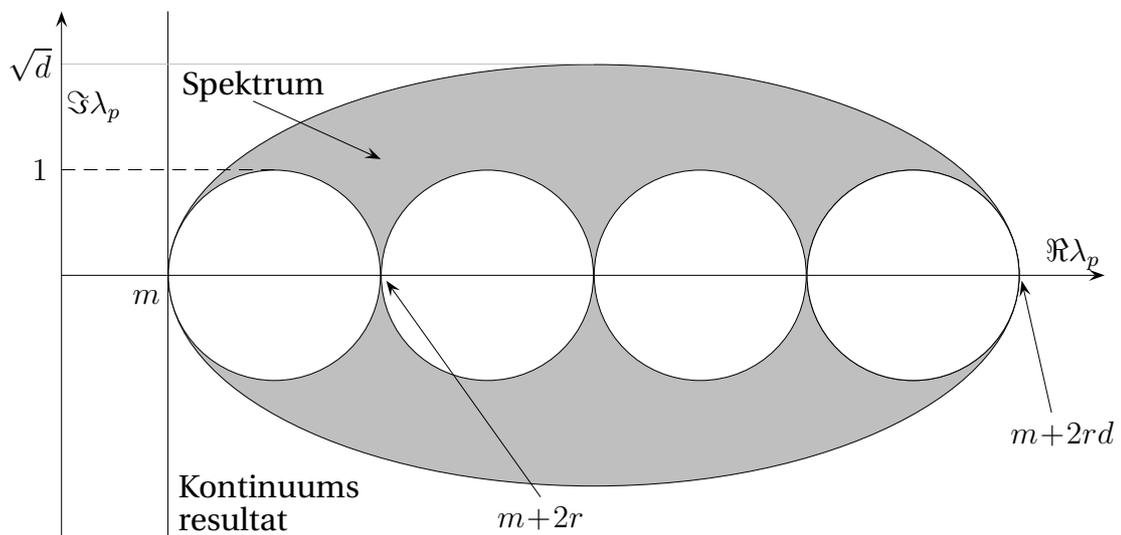
$$t_i = -\cos p_i \in [-1, 1]. \tag{13.70}$$

Die Kanten des von den Koordinaten t_i aufgespannten Würfels werden auf d sich auf der reellen Achse berührende Ellipsen mit Halbachsen $A = r, B = 1$ und den Mittelpunkten

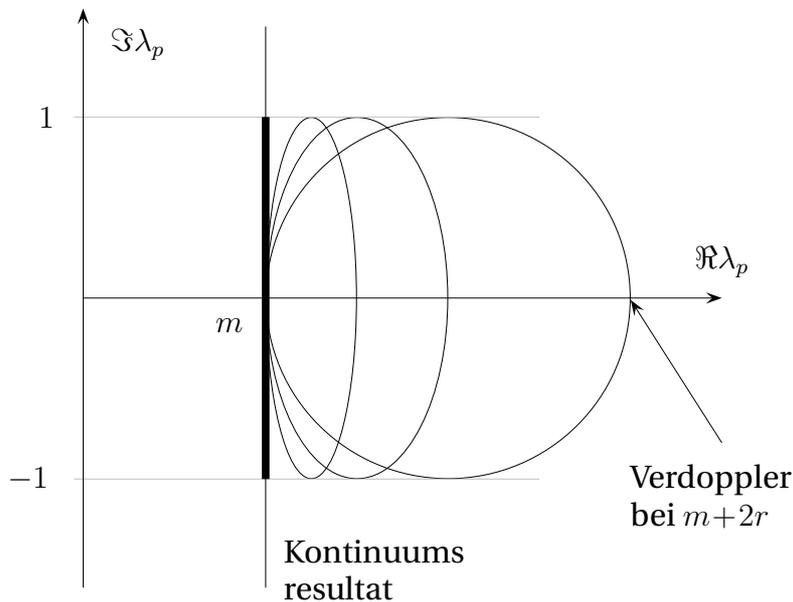
$$(m + r, 0), (m + 3r, 0), \dots, (m + 2d - 1, 0) \tag{13.71}$$

abgebildet. Diese Schleifen bilden den inneren Rand des Spektrums von D_w . Alle Punkte des Würfels mit gleichen Koordinaten $t_1 = \dots = t_d = t$ werden auf eine diese d Ellipsen *umschliessende* Ellipse mit Halbachsen $A = rd, B = \sqrt{d}$ und dem Mittelpunkt $(0, m + rd)$ abgebildet. Die grosse Ellipse schliesst das Spektrum ein. Alle Ellipsen liegen spiegelsymmetrisch zur reellen Achse.

In der folgenden Abbildung findet man die Eigenwerte des 4-dimensionalen Dirac-Operators für Wilson-Fermionen mit $r = 1$ und für $N = \infty$. Für $r \rightarrow 0$ geht die Menge der Eigenwerte (das graue Gebiet) über in die Gerade mit Realteil m , also in das Spektrum des Kontinuum-Operators im thermodynamischen Grenzfall. Für $m = 0$ und $r \rightarrow 0$ streben die Eigenwerte bei $0, 2r, 4r, \dots$ alle gegen den Eigenwert Null und wir finden wieder die ungeliebten Verdoppler des naiven Operators \hat{D} .



In *einer Dimension* gibt es nur eine innere Ellipse, die mit der äusseren zusammenfällt. Alle Eigenwerte liegen dann auf der Ellipse $m + r(1 + t) \pm i\sqrt{1 - t^2}$, $t \in [-1, 1]$ mit den Halbachsen r und 1 ,



Für $r = 1$ findet man den Rückwärtsableitung, für $r = -1$ die Vorwärtsableitung und für $r = 0$ die antisymmetrische Gitterableitung. Strebt r gegen Null, dann wandern alle Eigenwerte auf das Intervall $m + i[-1, 1]$. Der Zustand mit Eigenwert $m + 2r$ „verdoppelt“ denjenigen mit Eigenwert m . Für $r > 0$ wirkt der Wilson-Term in (13.68) wie eine impulsabhängige Masse und selbst für $m = 0$ anti-vertauscht D_w nicht mit γ_5 . Die *Chiralität* wird durch den Wilson-Term explizit *gebrochen*. Für das freie Dirac-Feld wird die Symmetrie im Kontinuums-limes wieder hergestellt.

Wir studieren den naiven Kontinuums-limes des Wilson-Operators. Dazu werden Impulse und die Masse mit der Gitterkonstante a reskaliert. Insbesondere sind \hat{p}_μ und \hat{p}_μ die in (13.69) definierten Gitterfunktionen. Die Eigenwerte von D_w sind dann

$$\lambda_{w,p} = m + \frac{ar}{2} \hat{p}^2 \pm i|\hat{p}| = m \pm i|p| + \frac{1}{2} ar p^2 + O(a^2). \tag{13.72}$$

Sie liegen zwischen der äusseren Ellipse mit Mittelpunkt und Halbachsen

$$x_0 = m + \frac{1}{a} rd, \quad \text{und} \quad (A, B) = \frac{1}{a} (rd, \sqrt{d})$$

und den d inneren Ellipsen mit

$$x_{0k} = m + \frac{1}{a} rk \quad \text{und} \quad (A, B) = \frac{1}{a} (r, 1), \quad k = 1, \dots, d.$$

Wie erwartet geht im Limes $a \rightarrow 0$ das Spektrum in das Kontinuumspektrum über.

13.2.4 Staggered Fermionen

Neben Wilson-Fermionen werden oft auch staggered Fermionen (Kogut-Wilson-Fermionen) in Simulationen eingesetzt. Ersetzen wir in der naiven Wirkung (13.52),

$$S_{\text{n,F}} = \sum_{x,\mu} \left[\sum_{\mu} \bar{\psi}(x) \gamma^{\mu} (\partial_{\mu}^{\text{A}} \psi)(x) + m \bar{\psi}(x) \psi(x) \right] \quad (13.73)$$

die Spinorfelder ψ durch die transformierten Felder χ in

$$\psi(x) = T(x)\chi(x), \quad \bar{\psi}(x) = \bar{\chi}(x)T^{\dagger}(x) \quad \text{mit} \quad T(x) = \gamma_0^{x_0} \cdots \gamma_{d-1}^{x_{d-1}}, \quad (13.74)$$

dann wird der Diracoperator diagonal im Spinraum und entsprechend die Wirkung zu einer Summe von vier identischen Wirkungen für die Komponenten des neuen Spinorfeldes,

$$S_{\text{n,F}}[\bar{\psi}, \psi] = \sum_{\alpha} S_{\text{s,F}}[\bar{\chi}_{\alpha}, \chi_{\alpha}], \quad S_{\text{s,F}}[\bar{\chi}, \chi] = \sum_{x,y} \chi^*(x) Q_{\text{s}}(x, y) \chi(y) \quad (13.75)$$

mit normalen Matrix

$$Q_{\text{s}}(x, y) = \Gamma_{\mu}(x) \partial_{\mu}^{\text{A}}(x, y) + m \delta(x, y), \quad \Gamma_{\mu}(x) = (-1)^{x_0 + x_1 + \dots + x_{\mu-1}}, \quad (13.76)$$

Nun kommt der wesentliche Schritt der Konstruktion. Von den vier Kopien der Wirkung behalten wir nur eine und diese ist gerade die gesuchte Wirkung für die staggered Fermionen. Wir verbleiben also nur einen fermionischen Freiheitsgrad je Gitterpunkt und von der Diracstruktur verbleiben nur die orts- und richtungsabhängigen Phasen $\Gamma_{\mu}(x)$. Diese Wirkung hat noch eine verbleibende chirale Symmetrie. Um dies einzusehen führen wir die Gitterfunktion

$$\epsilon(x) = (-1)^{x_0 + x_1 + \dots + x_{d-1}} \quad (13.77)$$

ein, die auf dem geraden Untergitter den Wert 1 und dem ungeraden Untergitter den Wert -1 annimmt. Für $m = 0$ enthält die Wirkung nur eine nächste Nachbar-Wechselwirkung zwischen dem Feld auf den geraden mit dem Feld auf den ungeraden Gitterpunkten. Dann ist für $m = 0$ die Gitterwirkung für staggered Fermionen invariant unter den $U(1)$ -Transformationen des einkomponentigen Feldes $\bar{\chi}$ und χ ,

$$\bar{\chi}(x) \rightarrow e^{\alpha \epsilon(x)} \bar{\chi}(x) \quad , \quad \chi(x) \rightarrow e^{\alpha \epsilon(x)} \chi(x). \quad (13.78)$$

Mit Hilfe des einkomponentigen Feldes χ kann man in d Dimensionen wieder auf einem verdünnte Gitter $2^{d/2}$ Flavours von Diracspinoren rekonstruieren. Dazu zerlegen wir das Gitter in 2^d disjunkte Untergitter Λ_ρ mit Gitterkonstanten $2a$. Den Index $\rho \in \{0, 2, \dots, 2^d - 1\}$ schreiben wir in Binärform,

$$\rho = \rho_0 + \rho_1 \cdot 2 + \rho_2 \cdot 2^2 + \dots + \rho_{d-1} \cdot 2^{d-1}, \quad \rho_\mu \in \{0, 1\},$$

und ordnen ihm den Vektor

$$f_\rho = \sum_{\mu} \rho_\mu e_\mu \quad (13.79)$$

zu. Das Feld $\{\chi_\rho\}$ auf dem Untergitter Λ_ρ hat die Werte

$$\chi_\rho(x) = \chi(2x + f_\rho), \quad \rho = 0, \dots, 2^d - 1. \quad (13.80)$$

Aus den Feldern $\{\chi_\rho\}$ können wir nun $2^{d/2}$ Flavours von Diracfeldern ψ^f , $f = 1, \dots, 2^{d/2}$ mit Komponenten ψ_α^f , $\alpha = 1, \dots, 2^{d/2}$ wie folgt konstruieren,

$$\hat{\psi}_\alpha^f(x) = \mathcal{N}_0 \sum_{\rho} (T_\rho)_{\alpha f} \chi_\rho(x), \quad (13.81)$$

wobei wir die Matrizen

$$T_\rho = \gamma_0^{\rho_0} \gamma_1^{\rho_1} \dots \gamma_{d-1}^{\rho_{d-1}}. \quad (13.82)$$

benötigen. Nun gilt

$$S_{s,F} = \sum_{x,\rho} \chi_\rho^*(x) \left(\chi_\rho(x + \frac{1}{2}e_\mu) - \chi_\rho(x - \frac{1}{2}e_\mu) \right)$$

13.3 Das Nielsen-Ninomiya Theorem

Keine der vorgeschlagenen Fermionen auf dem Gitter, weder naive, staggered oder Wilson-Fermionen sind ohne Probleme. Die ersten beiden haben das Veropplungsproblem, und die letzten brechen die chiral Symmetrie. Eine beliebige bilineare Wirkung für Spin- $\frac{1}{2}$ Fermionen auf dem Raumzeit-Gitter hat die Form

$$S = \sum_{x,y} \bar{\psi}(x) M(x,y) \psi(y), \quad (13.83)$$

wobei wegen der Translationsinvarianz der Dirac-Operator nur von $x - y$ abhängt,

$$M(x, y) = D(x - y), \quad (13.84)$$

Es stellt sich nun die Frage, warum die Diskretisierung von Fermionen ohne Verdoppler und ohne Brechung der chiralen Symmetrie so schwierig ist. Die Antwort gibt das bekannte No-go Theorem von NIELSEN und NINOMIYA welches besagt, dass es keine lokale, chiral invariante, verdopplungsfreie und translationsinvariante bilineare Fermionwirkung auf dem Gitter gibt [68]. Man findet die gleiche Anzahl rechts- und linkshändiger Fermionen. Etwas präziser besagt das Theorem:

Satz (Nielsen-Ninomyia) *Es gibt keinen translationsinvarianten Dirac-Operator der folgende vier Eigenschaften gleichzeitig erfüllt:*

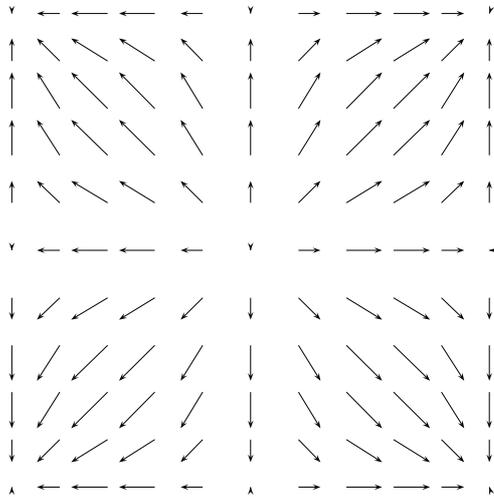
- *Lokalität:* $D(x - y) \sim e^{-\gamma|x-y|}$,
- *Kontinuumslices:* $\lim_{a \rightarrow 0} \tilde{D}(p) = \sum_{\mu} \gamma^{\mu} p_{\mu}$,
- *Keine Verdoppler:* $\tilde{D}(p)$ ist invertierbar für $p \neq 0$,
- *Chiral:* $\{\gamma_5, D\} = 0$.

Die Lokalität bedeutet, dass die Fourier-Transformierte \tilde{D} von D eine analytische und periodische Funktion der Impulse p_{μ} mit Periode $2\pi/a$ ist. Die zweite und dritte Forderung sorgen dafür, dass D den korrekten Kontinuumslices hat.

In [68] wurde das Theorem mit Argumenten aus der Homotopietheorie und Differentialtopologie bewiesen. Ein eleganter differentialgeometrischer Beweis findet sich in [69]. Wir beweisen das Theorem unter der zusätzlichen und vereinfachenden Annahme [70], dass im Impulsraum

$$\tilde{D}(p) = \sum \gamma^{\mu} \tilde{D}_{\mu}(p) \quad \text{mit} \quad \tilde{D}_{\mu}(p) \in \mathbb{R}. \quad (13.85)$$

Die Funktionen \tilde{D}_{μ} sind analytisch und streben für kleine Impulse gegen p_{μ} . Da die Brillouinzone die Topologie eines Torus in d Dimensionen hat, definiert \tilde{D}_{μ} ein Vektorfeld auf T^d . Nun können wir jeder Nullstelle des Vektorfeldes den Index zuordnen. Die Anzahl Nullstellen sei endlich. Nach dem Indextheorem von HOPF und POINCARÉ ist die Summe der Indizes aller Nullstellen auf einer kompakten und orientierten Mannigfaltigkeit gleich der Euler-Charakteristik der Mannigfaltigkeit. Für den d -dimensionalen Torus verschwindet diese Charakteristik und die Nullstellen von \tilde{D}_{μ} treten in Paaren mit entgegengesetztem Index auf. Dies ist der Ursprung der Verdoppler. Anstelle von $\gamma^{\mu} \tilde{D}_{\mu}$ hätte man in (13.85) auch den Operator $\frac{1}{2} \gamma^{\mu} (1 + \gamma_*) \tilde{D}_{\mu}$ für Fermionen mit Chiralität $+1$, zum Beispiel Neutrinos, wählen können [70].



In der Abbildung links ist das Vektorfeld $\tilde{D}_\mu(p)$ für den naiven Diracoperator in zwei Dimensionen in der ersten Brillouin-Zone gezeigt. An den Nullstellen $p = (0, 0)$ und (π, π) hat \tilde{D} den Index 1 und an den Nullstellen $p = (0, \pi)$ und $(\pi, 0)$ den Index -1 . Die Summe der Indexe verschwindet, in Einklang mit dem Theorem von HOPF und POINCARÉ. Man sieht hier sehr schön die Verdopplung bei den Impulsen $(\pi, 0)$, $(0, \pi)$ und (π, π) .

Allgemein ist in der Nähe einer Nullstelle p_0 von \tilde{D}_μ

$$\tilde{D}_\mu(p) = A_{\mu\nu} (p - p_0)^\nu + \dots, \quad A_{\mu\nu} = \left. \frac{\partial \tilde{D}_\mu}{\partial p_\nu} \right|_{p_0}.$$

Der Index des Vektorfeldes \tilde{D} bei p_0 ist gleich dem Vorzeichen von $\det A$. Ist zum Beispiel A diagonal bei der Nullstelle $p_0 = 0$, dann ist $\tilde{D}_\mu(p) = A_\mu p_\mu + O(p^2)$. Für $A = \text{diag}(1, 1, 1, 1)$ ist der Index 1 und in der Umgebung der Nullstelle ist

$$\bar{\psi} \gamma^\mu \tilde{D}_\mu(p) \psi \approx \bar{\psi} \gamma^\mu p_\mu \psi. \tag{13.86}$$

Das Dirac-Feld ψ transformiert unter einer chiralen Transformation in $\exp(\alpha \gamma_5) \psi$. Ist dagegen $A = \text{diag}(-1, 1, 1, 1)$, so hat das Vektorfeld den Index -1 und die Lagrange-dichte in der Nähe der Nullstelle (die wieder bei 0 liege) die Form

$$\bar{\psi} \gamma^\mu \tilde{D}_\mu(p) \psi \approx \bar{\psi} \gamma_5 \gamma^0 (\gamma^\mu p_\mu) \gamma^0 \gamma_5 \psi \equiv \bar{\chi} \not{p} \chi. \tag{13.87}$$

Jetzt interpretieren wir $\chi = \gamma^0 \gamma_5 \psi$ als Dirac-Feld, und dieses Feld transformiert unter chiralen Transformationen in $\exp(-\alpha \gamma_5) \chi$, also mit der zu ψ entgegengesetzten Chiralität. Jedem Pol des masselosen Propagators entspricht ein fermionischer Einzelchenzustand. Wir folgern, dass es zu jedem Fermion mit Chiralität $+1$ ein Fermion mit Chiralität -1 geben muss. Es scheint daher unmöglich, linkshändige Neutrinos auf ein Gitter zu setzen.

13.4 Ginsparg-Wilson Relation

Als Konsequenz des *Nielsen-Ninomiya-Theorems* scheint es unmöglich, einen chiral invarianten Dirac-Operator zu konstruieren. In einer in den letzten Jahren vielbeachteten Arbeit untersuchten GINSPARG und WILSON bereits 1982, wie nahe man auf dem Gitter einem chiralen Dirac-Operator kommen kann [71]. Ausgangspunkt ihrer Betrachtungen war eine invariante Kontinuumtheorie, die sie mit Hilfe einer Blocktransformation mit einer Gittertheorie in Verbindung brachten. Dem Kontinuumsfeld $\phi : \mathbb{R}^d \rightarrow \mathbb{C}^p$ wird über eine Blocktransformation

$$\psi(x) = \int d^4y \alpha(x-y)\phi(y), \quad x \in \Lambda \quad (13.88)$$

ein Gitterfeld zugeordnet. Die genaue Form der Gewichtsfunktion ist hier nicht wichtig. Die Frage war, wie nahe die für ψ induzierte Gitterwirkung einer chiral invarianten Wirkung kommen kann. GINSPARG und WILSON argumentierten, dass die optimale Wahl auf die sogenannte *Ginsparg-Wilson-Relation*

$$\gamma_5 D + D \gamma_5 = a D \gamma_5 D \quad (13.89)$$

führt. Die Gitterkonstante a auf der rechten Seite impliziert, dass für „infrarot-Felder“ (oder äquivalent dazu, für genügend kleine a) die Relation in die gewünschte Kontinuumsrelation $\gamma_5 D + D \gamma_5 = 0$ übergeht.

Wir multiplizieren die Relation (13.89) von beiden Seiten mit $S = D^{-1}$ und finden

$$S \gamma_5 + S \gamma_5 = a \gamma_5 \implies S(x, y) \gamma_5 + S(x, y) \gamma_5 = a \gamma_5 \delta^d(x - y). \quad (13.90)$$

Die Verletzung der chiralen Symmetrie ist für den Propagator ultralokal. Für alle endlichen Abstände finden wir einen Propagator mit exakter chiralen Symmetrie. Es zeigt sich, dass diese Eigenschaft genügt um alle erwünschten Konsequenzen der chiralen Symmetrie, zum Beispiel die Abwesenheit einer additiven Massenrenormierung, auf dem Gitter zu erhalten.

M. LÜSCHER bemerkte, dass die fermionische Wirkung

$$S_F = a^d \sum_x \bar{\psi}(x) D(x - y) \psi(y) \quad (13.91)$$

für jeden Dirac-Operator, der die Ginsparg-Wilson-Relation (13.89) erfüllt, ein kontinuierliche Symmetrie hat, die als Gitterversion der chiralen Symmetrie interpretiert

wird [72]. Diese deformierte chirale Symmetrie hat die Form

$$\psi \longrightarrow \psi_\alpha = e^{\alpha\gamma_5(1-\frac{a}{2}D)} \psi \quad \text{und} \quad \bar{\psi} \longrightarrow \bar{\psi}_\alpha = \bar{\psi} e^{\alpha(1-\frac{1}{2}aD)\gamma_5}. \quad (13.92)$$

Wir beweisen, dass $\bar{\psi}_\alpha D\psi_\alpha$ unabhängig von α ist,

$$\frac{d}{d\alpha} (\bar{\psi}_\alpha D\psi_\alpha) = \bar{\psi}_\alpha \left\{ (1 - \frac{1}{2}aD)\gamma_5 D + D\gamma_5 (1 - \frac{1}{2}aD) \right\} \psi_\alpha \stackrel{(13.89)}{=} 0.$$

Allerdings ist das fermionische Integrationsmass $\mathcal{D}\psi\mathcal{D}\bar{\psi}$ ist im Allgemeinen nicht invariant unter der Transformation (13.92). Diese Eigenschaft sorgt dafür, dass in Anwesenheit von äusseren Eichfeldern die axiale Anomalie auftritt.

In der Vergangenheit wurden mehrere Familien von Dirac-Operatoren konstruiert, welche die Ginsparg-Wilson-Relation erfüllen. Die bekanntesten sind

- *Domain-Wall Fermionen* [73],
- *Überlapp-Operatoren (overlap-operators)* [74, 77],
- *Fixpunkt-Operatoren* [75],
- *Chiral-verbesserte Operatoren* [76].

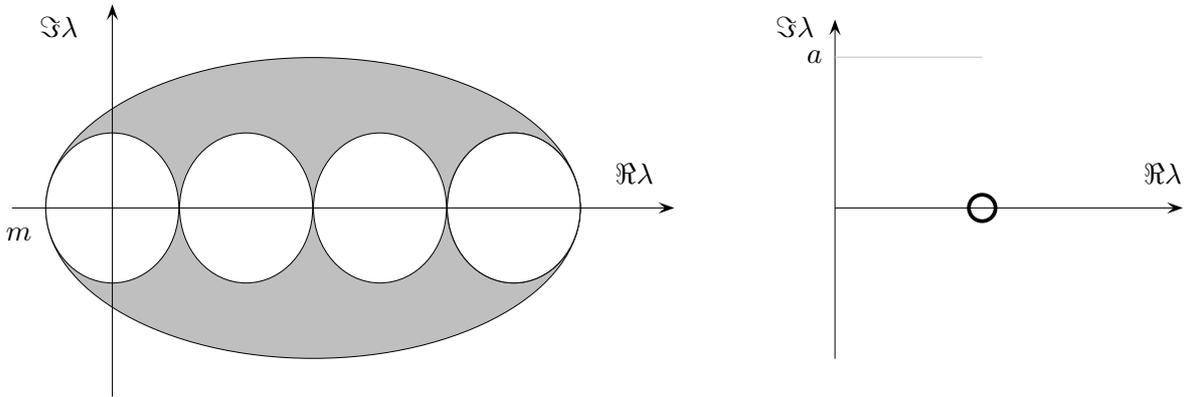
Für drei dieser Vorschläge verweise ich auf die angegebene Literatur. Im Folgenden besprechen wir die Überlapp-Operatoren. Deren Konstruktion geht auf NEUBERGER und NARAYANAN zurück.

Überlapp-Fermionen

Ein erster Operator der die Ginsparg-Wilson-Bedingung erfüllt, wurde in [74, 77] vorgestellt. Dieser sogenannte „Überlapp-Operator“ hat die Form

$$D_o = \frac{1}{a}(\mathbb{1} + V) \quad \text{mit} \quad V = (D_w D_w^\dagger)^{-1/2} D_w, \quad m < 0, \quad (13.93)$$

wobei D_w der Wilson-Operator ist. Der Operator V ist unitär mit Spektrum auf dem Einheitskreis. Entsprechend hat der Überlapp-Operator seine Eigenwerte auf einem die imaginäre Achse am Ursprung berührenden Kreis.



Die linke Seite in der Ginsparg-Wilson-Relation (13.89) ist

$$D\gamma_5 + \gamma_5 D = 2\gamma_5 + \{\gamma_5, V\}.$$

Um die rechte Seite umzuformen, macht man Gebrauch von

$$[D_w, D_w^\dagger] = 0 \quad \text{und} \quad \gamma_5 D_w = D_w^\dagger \gamma_5 \quad \text{und} \quad [D_w D_w^\dagger, \gamma_5] = 0, \quad (13.94)$$

woraus sich $V\gamma_5 V = \gamma_5$ ergibt. Deshalb ist

$$D\gamma_5 D = \gamma_5 + \{\gamma_5, V\} + V\gamma_5 V = 2\gamma_5 + \{\gamma_5, V\},$$

was zu beweisen war.

Ein Nachteil des Vorschlags ist das Auftreten des inversen Operators von $D_w D_w^\dagger$. Es ist nicht offensichtlich, dass D_o ein lokaler Operator ist. Man unterscheidet zwischen *ultralokalen* Operatoren, für die $D(x - y)$ für $|x - y| > \ell$ verschwindet und *lokalen* Operatoren, für die $D(x - y)$ mit dem Abstand der Gitterpunkte exponentiell schnell gegen Null strebt. Für $a \rightarrow 0$ werden lokale Operatoren im Kontinuum zu exakt lokalen Operatoren. Um die Lokalität von D_o zu erkennen, betrachtet man seine Spektraldarstellung. Wegen

$$D_w D_w^\dagger = -\hat{\Delta} + \left(m - \frac{ar}{2}\hat{\Delta}\right)^2 \quad (13.95)$$

hat der Überlapp-Operator im Impulsraum die Form

$$a\tilde{D}_o(p) = 1 + \left\{i\gamma^\mu \hat{p}_\mu + m + \frac{ar}{2}\hat{p}^2\right\} \left\{\hat{p}^2 + \left(m + \frac{ar}{2}\hat{p}^2\right)^2\right\}^{-1/2}. \quad (13.96)$$

Er erfüllt die ersten drei Bedingungen im Satz von Nielsen und Ninomiya. Insbesondere ist $\tilde{D}_o(p)$ analytisch und deshalb verschwindet $D_o(x - y)$ exponentiell für gros-

se Distanzen. Wir fassen zusammen: Der Überlapp-Operator von NEUBERGER und NARAYANAN ist nicht hermitesch aber immer noch normal, er ist lokal und hat keine Verdoppler und er ist chiral im Sinne von LÜSCHER. In Simulationen ist er aber teuer, da in Gegenwart von Eichfeldern (siehe nächstes Kapitel) die Inversion von $D_w D_w^\dagger$ relativ viel Zeit kostet. Für $m = 0$ und nichtverschwindende Eichfelder können wieder unerwünschte Nullmoden auftreten.

13.4.1 Weitere Vorschläge

Neben den staggered Fermionen gibt es weitere Konstruktionen, für welche die Anzahl Verdoppler kleiner als für die naiven Fermionen ist und trotzdem die Chiralität erhalten ist. Mit Hilfe der chiralen Projektoren $P_\pm = \frac{1}{2}(1 \pm \gamma_*)$ kann man den normalen Operator

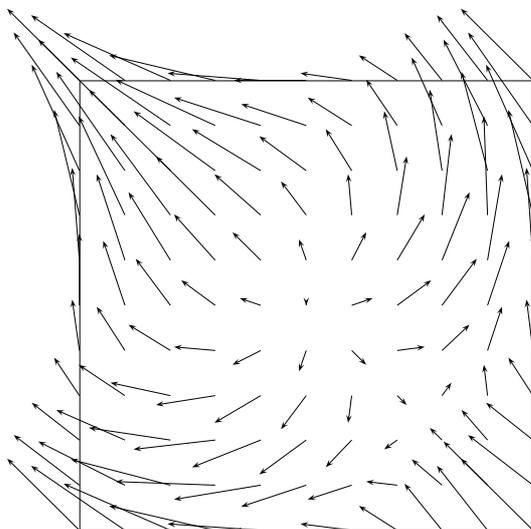
$$D = \gamma^\mu (P_+ \partial_\mu + P_- \partial_\mu^*) + m = \mathring{D} + \gamma_* \gamma^\mu \partial_\mu^S, \quad \partial_\mu^S = \frac{1}{2} (\partial_\mu^* - \partial_\mu) \quad (13.97)$$

definieren. Im chiralen Limes $m \rightarrow 0$ ist D anti-hermitesch und antikommutiert mit γ_* . Im Impulsraum hat er die Form

$$\tilde{D}(p) = i\gamma^\mu \hat{p}_\mu + m + \frac{1}{2} \gamma_* \gamma^\mu \hat{p}_\mu^2. \quad (13.98)$$

Sein „Betragsquadrat“ vereinfacht sich zu

$$\tilde{D} \tilde{D}^\dagger = \hat{p}^2 + m^2 - i\gamma_* \gamma^{\mu\nu} \hat{p}_\mu \hat{p}_\nu \sin\left(\frac{p_\mu - p_\nu}{2}\right). \quad (13.99)$$



In zwei Dimensionen hat das Vektorfeld \tilde{D}_μ für $\gamma_* = -i\gamma^0\gamma^1$ die Form

$$\tilde{D}_\mu(p) = \left(\hat{p}_0 - \frac{1}{2}\hat{p}_1^2, \hat{p}_1 + \frac{1}{2}\hat{p}_0^2 \right)$$

In der Abbildung links ist es in der ersten Brillouin-Zone gezeigt. Die Nullstellen sind bei $(0, 0)$ und $(\pi/2, -\pi/2)$ und die zugehörigen Indexe sind 1 und -1 . Man sieht hier explizit die Brechung der hyperkubischen Symmetrie.

Zum Berechnen der Nullstellen betrachtet man am Besten das „Betragsquadrat“ des zweidimensionalen Operators,

$$\tilde{D}\tilde{D}^\dagger = \hat{p}^2 + m^2 + 2\hat{p}_0\hat{p}_1 \sin\left(\frac{p_0 - p_1}{2}\right). \quad (13.100)$$

Die rechte Seite kann im chiralen Grenzfall nur Null werden, wenn der Sinus ± 1 ist. Wir wählen für den Wertebereich der Impulse das Intervall $[-\pi, \pi]$. Dann ist der letzte Sinus gleich 1 für $p_0 - p_1 = \pi$ und er ist gleich -1 für $p_0 - p_1 = -\pi$. Für beide Fälle vereinfacht sich der Ausdruck zwischen den Klammern zu

$$\left(\sin \frac{p_1}{2} + \cos \frac{p_1}{2} \right)^2 = 0 \implies p_1 = -\frac{\pi}{2}, \quad p_0 = \frac{\pi}{2}.$$

Damit hat in zwei Dimensionen der Operator DD^\dagger vier Nullmoden in der ersten Brillouinzone, zwei bei $\mathbf{p} = (0, 0)$ und zwei bei $\frac{1}{2}(\pi, -\pi)$. Diese Verminderung der Nullmoden gegenüber dem naiven Dirac-Operator bezahlt man mit dem Verlust der hyperkubischen Symmetrie aufgrund des Sinus-Terms in (13.100). In zwei Dimensionen wird diese Symmetrie erzeugt durch

$$\mathbf{p} \longrightarrow i\sigma_2\mathbf{p}. \quad (13.101)$$

13.5 Programme zu Kapitel 10

Das folgende octave-Programm `derinverse` berechnet die Zweifunktfunction (13.33) als Funktion von x . Sie ist für $x = 1$ auf 1 normiert. Abgefragt wird die Masse. Das

Resultat und der exponentielle Fit $\exp(-mx)$ mit der Masse im Propagator werden angezeigt.

```
function derinverse ;
# berechnet das Inverse von
# partial + m fuer die Linksableitung ,
# antisymmetrische Ableitung und
# Slac-Ableitung.
wahl=input(" links_=1, antisymmetrisch_=2, slac_=3 ");
m=input(" masse_= ");
N=40;
a=eye(N);
x=[0:N-1]';
##### Linksableitung
if_(wahl==1)
#pa=a-shift(a,1);
pa=a-shift(a,1)+m*a;
#pa=pa*pal'+m*m*a;
##### Antisymmetrische Ableitung
elseif (wahl==2)
##pa=m*a+0.5*(shift(a,-1)-shift(a,1));
pa=m*a+0.5*(shift(a,-1)-shift(a,1));
#pa=m*m*a-pal*pal;
else
##### Slac-Ableitung
## if (rem(N,2)==0)
## disp(' N_must_be_odd! ');
## break;
## endif;
ks=linspace(1,N-1,N-1);
hilf1=pi/N;
t=hilf1*ks;
t1=hilf1*(-1).^ks./sin(t);
#pa=toeplitz([0,t1],[0,-t1])+m*a;
pal=toeplitz([0,t1],[0,-t1]);
pa=-pal*pal+m*m*a;
endif;
##### Ende Slac-Ableitung
painv=inv(pa);
prop=painv(:,1)/painv(2,1);
data=[x,prop];
if (wahl==3)
#plot [0:40] data,exp(-m*(x-1))*prop(2);
plot [0:40] data,exp(-m*x);
#,prop(N/2-1+cosh(m*(N/2-x)));
else
plot [0:40] data,exp(-m*x);
endif;
derinverse=fopen("derinverse.dat","w","native");
for i=1:N
fprintf(derinverse,"%4.2f,%4.2f",x(i),2*prop(i));
if (rem(i,5)==0) fprintf(derinverse,"\n");
endif;
endfor;
fclose(derinverse);
endfunction;
```

Mit der folgenden kurzen Routine wurden die Vektorfelder \tilde{D}_μ für den zweidimensionalen Dirac-Operator berechnet und in einer für pstricks lesbaren Form abgespeichert.

```
function vectorfield;
# berechnet das Vektorfeld D_\mu(p) fuer
# den Diracoperaor im Impulsraum.
#
closeplot;
N=11;
Ns=N*N;
p=linspace(-pi,pi,N);
[a,b]=meshdom(p,p);
c=sin(a)-2*sin(b/2).*sin(b/2);
d=sin(b)+2*sin(a/2).*sin(a/2);
x=reshape(a,Ns,1);
y=reshape(b,Ns,1);
vx=reshape(c,Ns,1)/2;
vy=reshape(d,Ns,1)/2;
vectorfield=fopen("vectorfield.dat","w","native");
for i=1:Ns
fprintf(vectorfield,"\\psline{->}(%.2f,%.2f)...
(%.2f,%.2f)\n",x(i),y(i),x(i)+vx(i),y(i)+vy(i));
endfor;
fclose(vectorfield);
endfunction;
```

Literaturverzeichnis

- [1] M. Born und P. Jordan, *Zur Quantenmechanik*, Z. Phys. **34** (1925) 858.
- [2] M. Born, W. Heisenberg und P. Jordan, *Zur Quantenmechanik II*, Z. Phys. **35** (1926) 557.
- [3] P.A.M. Dirac, *The quantum theory of emission and absorption of radiation*, Roc. Roy. Soc. London **A 114** (1927) 243.
- [4] P. Jordan und W. Pauli, *Zur Quantenelektrodynamik*, Z. Phys. **47** (1928) 151; W. Heisenberg und W. Pauli, *Zur Quantendynamik der Wellenfelder I*, Z. Phys. **56** (1929) 1; *Zur Quantendynamik der Wellenfelder II*, Z. Phys. **59** (1930) 168.
- [5] W. Pauli und V. Weisskopf, *Zur Quantisierung der skalaren relativistischen Wellengleichung*, Helv. Phys. Acta **7** (1934) 709.
- [6] S.L. Glashow, *Partial-Symmetries of Weak Interaction*, Nucl. Phys. **22** (1961) 579; S. Weinberg, *A Model of Leptons*, Phys. Rev. Lett. **19** (1964) 1264; A. Salam, *Weak and Electromagnetic Interactions*, in N. Svartholm, editor, *Elementary Particle Theory*, Almquist and Wiksell, 1968.
- [7] P.A.M. Dirac, *The Lagrangian in Quantum Mechanics*, Physikalische Zeitschrift der Sowjetunion **3** (1933) 64; *The Principles of Quantum Mechanics*, Oxford University Press, 1947.
- [8] R. Feynman, *Space-time approach to non-relativistic quantum mechanic*, Rev. Mod. Phys. **20** (1948) 267;
- [9] F.J. Dyson, *The S-Matrix in quantum electrodynamics*, Phys. Rev. **75** (1949) 1736; G.C. Wick, *Properties of the Bethe-Salpeter wave function*, Phys. Rev. **96** (1954) 1124; J. Schwinger, *On the Euclidean structure of relativistic field theory*, Proc. Natl. Acad. Sci. U.S.A. **44** (1958) 956; K. Symanzik, *Euclidean quantum field theory, I. Equations for a scalar model*, J. Math. Phys. **7** (1966) 510.

- [10] F.J. Wegner, *Duality in Generalized Ising Models and Phase Transitions without Local Order Parameters*, J. Math. Phys. **10** (1971) 2259.
- [11] K.G. Wilson, *Confinement of quarks*, Phys. Rev. **D10** (1974) 2445.
- [12] M. Creutz, L. Jacobs und C. Rebbi, *Experiments with a gauge invariant Ising system*, Phys. Rev. Lett. **42** (1979) 1390; M. Creutz, *Confinement and the critical dimensionality of space-time*, Phys. Rev. Lett. **43** (1979) 553; *Monte Carlo Simulations in Lattice Gauge Theories*, Phys. Rep. **95** (1983) 201.
- [13] N. Wiener, *Differential Space*, J. Math. and Phys. Sci. **2** (1923) 132.
- [14] R. Feynman und A. Hibbs, *Quantum mechanics and path integrals*, McGraw-Hill, New York, 1965.
- [15] M. Kac, *Random Walk and the Theory of Brownian Motion*, Amer. Math. Monthly **54** (1947) 369.
- [16] I.M Gel'fand and A.M. Yaglom, *Integration in Functional Spaces and its Applications in Quantum Physics*, J. Math. Phys. **1** (1960) 48.
- [17] G. Roepstorff, *Path Integral Approach to Quantum Physics*, Springer, 1996.
- [18] L.S. Schulman, *Techniques and Applications of Path Integration*, John Wiley & Sons, Inc., 1981.
- [19] E. Nelson, *Feynman integrals and the Schrödinger equation*, J. Math. Phys. **5** (1964) 332.
- [20] S.G. Brush, *Functional Integrals and Statistical Physics*, Rev. Mod. Phys. **33** (1961) 79.
- [21] J. Glimm and A. Jaffe, *Quantum Physics, A Functional Integral Point of View*, Springer, 1981.
- [22] P.R. Chernoff, *Note on product formulas for operator semigroups*, J. Funct. Anal. **2** (1968) 238.
- [23] M. Reed and B. Simon, *Methods of Modern Mathematical Physics I*, Academic Press, 1972.
- [24] A. Wipf, *Pfadintegrale*, Vorlesung, Jena.
- [25] N. Metropolis und S. Ulam, *The Monte Carlo Method*, J. Am. Stat. Assoc. **44** (1949) 335.

- [26] M.E.J. Newman und G.G. Barkenna, *Monte Carlo Methods in Statistical Physics*, Clarendon Press, Oxford, 1999; S. Koonin, *Computational Physics*
- [27] N. Metropolis, A.W. Rosenbluth, M.N. Rosenbluth und A.H. Teller, *Equations of state calculations by fast computing machines*, J. Chem. Phys. **21** (1953) 1087.
- [28] W.K. Hasting, *Monte Carlo sampling methods using Markov chains and their applications*, Biometrika **170** (1970) 97.
- [29] S. Duane, A.D. Kennedy, A.D. Pendleton, B.J. Roweth, *Hybrid Monte Carlo*, Phys. Lett. **B195** (1987) 216-222.
- [30] M. Creutz und B.A.Freedman, *A statistical approach to quantum mechanics*, Annals of Physics **132** (1981) 427.
- [31] H.J. Rothe, *Lattice Gauge Theories - An Introduction*, World Scientific Publishing, 2005.
- [32] C. Urbach, *Untersuchung der Reversibilitatsverletzung beim Hybrid-Monte-Carlo-Algorithmus*, thesis FU Berlin (2002).
- [33] S. Gupta, A. Irback, F. Karch und B. Petersson, *The acceptance probability in the Hybrid Monte Carlo Method*, Phys. Lett. **B242** (1990) 437.
- [34] M. Kac, *On Some Connection between Probability Theory and Differential and Integral Equation*, Proc. 2nd Berkeley Smpos. Math. Stat. and Prob. (1951) 189.
- [35] J. Fröhlich, Nucl. Phys. **B200** (1982) 281; R. Fernandez, J. Fröhlich und A.D. Sokal, *Random Walks, Critical Phenomena and Triviality in Quantum Field Theory*, Springer (1992).
- [36] Für einen Überblick über die Geschichte des Ising-Modells siehe:
S. G. Brush, *History of the Lenz-Ising model*, Rev. Mod. Phys., 39 (1967) 883; S. Kobe, *Das Ising-Modell - gestern und heute*, <http://www.physik.tu-dresden.de/itp/members/kobe/isingphbl/>
- [37] W. Lenz, *Beitrag zum Verständnis der magnetischen Erscheinungen in Festkörper*, Z. Physik **21** (1920) 613.
- [38] E. Ising, *Beitrag zur Theorie des Ferromagnetismus*, Zeitschrift f. Physik **31** (1925) 253.
- [39] R.B. Potts, *Some generalized order-disorder transformations*, Proc. Camb. Phil. Soc. **48** (1952) 106.

- [40] C. N. Yang and T. D. Lee, *Statistical Theory of Equations of State and Phase Transitions. I. Theory of Condensation*, Phys. Rev. **87** (1952) 404; T. D. Lee and C. N. Yang, *Statistical Theory of Equations of State and Phase Transitions. II. Lattice Gas and Ising Model* Phys. Rev. **87** (1952) 410.
- [41] F.Y. Wu, *Self-dual property of the Potts model in one dimension*, cond-mat/9805301.
- [42] D.S. Gaunt und M.F. Sykes, *The critical exponent γ for the three-dimensionale Ising model*, J. Phys. A **12** (1979) L25; P. Butera und M. Comi, *Extension to order β^{23} of the high-temperature expansions for the spin 1/2 Ising model on the simple-cubic and body-centered-cubic lattices*, hep-lat/0006009 v3.
- [43] I.G. Enting, A.J. Guttmann und I. Jensen, *Low-temperature series expansions for the spin-1 Ising model*, J. Phys. **A27** (1994) 6987.
- [44] R. Savit, *Duality in field theory and statistical systems*, Rev. of Mod. Phys. **52** (1980) 453.
- [45] R. Peierls, *Statistical theory of adsorption with interaction between the adsorbed atoms*, Proc. Camb. Phil. Soc. **32** (1936) 471; *On Ising's Model of Ferromagnetism*, Proc. Camb. Phil. Soc. **32** (1936) 477.
- [46] H.A. Kramers und G.H. Wannier, *Statistics of the Two-Dimensional Ferromagnet. Part I*, Phys. Rev. **60** (1941) 252.
- [47] L. Onsager, *Crystal Statistics. I. A Two-Dimensional Model with an Order-Disorder Transition*, Phys. Rev. **65** (1944) 117.
- [48] G. Sylvester, *Continuous Spin Inequalities for Ising Ferromagnets*, MIT-preprint 1975.
- [49] L.P. Kadanoff, *Scaling laws for Ising models near T_c* , Physica 2 (1966) 263; M.E. Fisher, *The Renormalization Group in the Theory of Critical Behavior*, Rev. Mod. Phys. **46** (1974) 597; M.E. Fisher, *Renormalization group theory: Its basis and formulation in statistical physics*, Rev. Mod. Phys. **70** (1998) 653;
- [50] E.C.G. Stueckelberg and A. Peterman, Helv. Phys. Acta **26** (1953) 499; M. Gell-Mann and F.E. Low, *Quantum Electrodynamics at Small Distances*, Phys. Rev. **95** (1954) 1300; K.G. Wilson and J. Kogut, *The Renormalization Group and the ϵ Expansion*, Phys. Rep. **12** (1974) 75; E.J. Brezin, J.C. Le Guillou and J. Zinn-Justin, S. Weinberg, *New Approach to the Renormalization Group*, Phys. Rev. **D8** (1973) 3497;

- [51] K.G. Wilson, *Renormalization Group and Critical Phenomena. I. Renormalization Group and the Kadanoff Scaling Picture*, Phys. Rev. **B4** (1971) 3174; *Renormalization Group and Critical Phenomena. II. Phase-Space Cell Analysis of Critical Behavior*, Phys. Rev. **B4** (1971) 3184; *Renormalization Group Methods*, Adv. in Mathematics **16** (1975) 170; *The Renormalization Group: Critical Phenomena and the Kondo Problem*, **47** (1975) 773; *The renormalization group and critical phenomena*, Rev. Mod. Phys. **55** (1983) 583.
- [52] N.N. Bogoliubov and D.V. Shirkov, *Introduction to the Theory of Quantized Fields*, Interscience, New York 1959; *Field Theoretical Approach to Critical Phenomena*, in Phase Transitions and Critical Phenomena **6** (1976) 125, edited by C. Domb and M. S. Green, Academic, London 1976; P. Pfeuty and G. Toulouse, *Introduction to the Renormalization Group and to Critical Phenomena*, Wiley, New York 1977. D.J. Amit, *Field Theory, the Renormalization Group and Critical Phenomena*, World Scientific, Singapore, 1993.
- [53] J.I. Binney, N.J. Dowrick, A.J. Fisher und M.E.J. Newmann, *The Theory of Critical Phenomena. An Introduction to the Renormalization Group*, Clarendon Press, Oxford 1992.
- [54] S.K. Ma, *Renormalization Group by Monte Carlo Methods*, Phys. Rev. Lett. **37** (1976) 461; R.H. Swendsen, *Monte Carlo Renormalization Group*, Phys. Rev. Lett. **42** (1979) 859; *Monte Carlo Calculation of Renormalized Coupling Parameters*, Phys. Rev. Lett. **52** (1984) 1165.
- [55] E. Elizalde, S.D. Odintsov, A. Romeo, A.A. Bytsenko und S. Zerbini, *Zeta Regularization Techniques with Applications*, River Edge, NJ: World Scientific, 1994.
- [56] S. Blau, M. Visser und A. Wipf, *Determinants, Dirac Operators and One-Loops Physics*, Int. J. Mod. Phys. **A4** (1989) 1467-1484.
- [57] I. Sachs und A. Wipf, *Finite Temperature Schwinger Model*, Helv. Phys. Acta **65** (1992) 652; A. Dettki and A. Wipf, *Finite Size Effects From General Covariance And Weyl Anomaly*, Nucl. Phys. **B377** (1992) 252; C. Wiesendanger und A. Wipf, *Running Coupling Constants From Finite Size Effects* Annals Phys. **233** (1994) 125.
- [58] L. O’Raifeartaigh, A. Wipf und H. Yoneyama, *The Constraint Effective Potential*, Nucl. Phys. **B271** (1986) 653.
- [59] Y. Fujimoto, L. O’Raifeartaigh and G. Parravicini, *Effective Potential for nonconvex Potentials*, Nucl. Phys. **B212** (1983) 268.

- [60] J. Goldstone, A. Salam and S. Weinberg, *Broken Symmetries*, Phys. Rev. **D7** (1962) 965; R. Jackiw, *Functional evaluation of the effective potential*, Phys. Rev. **D9** (1974) 1686; see K. Huang, *Quarks, Leptons and Gauge Fields*, World Scientific (1982).
- [61] C. Wiesendanger und A. Wipf, *Running Coupling Constants From Finite Size Effects*, Annals Phys. **233** (1994) 125.
- [62] P.H. Dondi und H. Nicolai, *Lattice Supersymmetry*, Nuovo Cim. **A41** (1977) 1; K. Fujikawa, *Supersymmetry on the Lattice and the Leibniz Rule*, Nucl. Phys. **B636** (2002) 80.
- [63] Y. Fujimoto, A. Wipf and H. Yoneyama, *Symmetry Restoration of Scalar Models at Finite Temperature*, Phys. Rev. **D 38** (1988) 2625-2634.
- [64] K. Wilson, in *New Phenomena in Subnuclear Physics*, ed. A. Zichichi, Plenum, New York 1977; L. Susskind, Phys. Rev. **D16** (1977) 3031.
- [65] *Hamiltonian formulation of Wilson's lattice gauge theory*, J. Kogut und L. Susskind, Phys. Rev. **D11** (1975) 395.
- [66] S.D. Drell, M. Weinstein, and S. Yankielowicz, *Variational Approach to Strong Coupling Field Theory. 1. ϕ^4 Theory*, Phys. Rev. **D14** (1976) 487; *Strong Coupling Field Theories: 2. Fermions and Gauge Fields on a Lattice*, Phys. Rev. **D14** (1976) 1627.
- [67] L.H. Karsten und J. Smit, *The Vacuum Polarization with SLAC Lattice Fermions*, Phys. Lett. **B85** (1979) 100.
- [68] H. Nielsen und M. Ninomiya, *Absence of Neutrinos on a Lattice (I). Proof by Homotopy Theory*, Nucl. Phys. **B185** (1981) 20; Nucl. Phys. **B193** (1981) 173; L.H. Karsten und J. Smit, *Lattice Fermions: Species Doubling, Chiral Invariance and the Triangle Anomaly*, Nucl. Phys. **B183** (1981) 103.
- [69] D. Friedan, *A Proof of the Nielson Ninomiya Theorem*, Commun. Math. Phys. **85** (1982) 481.
- [70] C. Itzykson und J.M. Drouffe, *Statistical Field Theory I*, Cambridge monographs on mathematical Physics, CUP, 1989.
- [71] P.H. Ginsparg and K.G. Wilson, *A Remnant of Chiral Symmetry on the Lattice*, Phys. Rev. **D25** (1982) 2649.

- [72] M. Lüscher, *Exact chiral symmetry on the lattice and the Ginsparg-Wilson relation*, Phys. Lett. **B428** (1998) 342.
- [73] D. Kaplan, *A Method for Simulating Chiral Fermions on the Lattice*, Phys. Lett. **B288** (1992) 342; Y. Shamir, *Chiral Fermion from Lattice Boundaries*, Nucl. Phys. **B406** (1993) 90; V. Furman und Y. Shamir, *Axial Symmetries in Lattice QCD with Kaplan Fermions*, Nucl. Phys. **B439** (1995) 54.
- [74] S.A. Frolov and A.A. Slavnov, *An Invariant Regularization of the Standard Model*, Phys. Lett. **B309** (1993) 344; R. Narayanan and H. Neuberger, *Infinitely many Regulator Fields for Chiral Fermions*, Phys. Lett. **B302** (1993) 62; R. Narayanan and H. Neuberger, *Chiral Determinants as an Overlap of two Vacua*, Nucl. Phys. **B412** (1994) 574.
- [75] P. Hasenfratz, *Lattice QCD without Tuning, Mixing and Current Renormalization*, Nucl. Phys. **B525** (1998) 401; P. Hasenfratz, *Prospects for Perfect Actions*, Nucl. Phys. Suppl. **63** (1998) 53; P. Hasenfratz, S. Hauswirth, T. Jorg, F. Niedermayer and K. Holland, *Testing the Fixed Point QCD Action and the Construction of Chiral Currents*, Nucl. Phys. **B643** (2002) 280.
- [76] C. Gattringer and I. Hip, *New Approximate Solutions of the Ginsparg-Wilson Equation: Tests in 2D*, Phys. Lett. **B480** (2000) 112; C. Gattringer, *A New Approach to Ginsparg-Wilson Fermions*, Phys. Rev. **D63** (2001) 114501; C. Gattringer et.al, *Quenched Spectroscopy with Fixed Point and Chirally Improved Fermions*, Nucl. Phys. **B677** (2004) 3.
- [77] H. Neuberger, *Exactly massless quarks on the lattice*, Phys. Lett. **B417** (1998) 141; H. Neuberger, *More about exactly massless quarks on the lattice*, Phys.Lett. **B427** (1998) 353.
- [78] Philippe de Forcrand und Oliver Jahn, *Comparison of $SO(3)$ and $SU(2)$ Lattice Gauge Theory*, Nucl. Phys. **B651** (2003) 125.
- [79] R.L. Karp, F. Mansouri, J.S. Rno, *Product integral formalism and non-Abelian Stokes theorem*, J. Math. Phys. **40** (1999) 6033; *Product integral representations of Wilson lines and Wilson loops, and non-Abelian Stokes theorem*, Turk. J. Phys. **24** (2000) 365.
- [80] K. Wilson, in *Recent Developments of Gauge Theories*, ed. G. 't Hoff et al. (Plenum, 1980)

- [81] K. Symanzik, Nucl. Phys. **B226** (1983) 187 *Continuum Limit and improved Action in Lattice Theories. 1. Principles and ϕ^4 Theory*; *Continuum Limit and Improved Action in Lattice Theories. 2. $O(N)$ Nonlinear Sigma Model in Perturbation Theory*, Nucl. Phys. **B226** (1983) 205
- [82] H.G. Dosch und V.V. Müller, *Lattice Gauge Theory in Two Spacetime Dimensions*, Fort. der Physik **27** (1979) 547.
- [83] L. Dittmann, T. Heinzl und A. Wipf, *An effective Lattice Theory for Polyakov Loops*, JHEP **0406** (2004) 005.
- [84] E. Seiler, *Upper bound on the color-confining potential*, Phys. Rev. **D18** (1978) 482; C. Bachas, *Convexity of the Quarkonium Potential*, Phys. Rev. **D33** (1986) 2723.
- [85] M. Lüscher, K. Symanzik und P. Weisz, *Anomalies of the free loop wave equation in WKB approximation*, Nucl. Phys. **B173** (1980) 365.
- [86] M. Lax, *Symmetry Principles in Solid State and Molecular Physics*, John Wiley & Sons, 1974, S. 438.
- [87] J.S. Lomount, *Applications of Finit Groups*, Academic Press, 1959; S.146.
- [88] Y. Chen et al., *Glueball spectrum and matrix elements on anisotropic lattices*, Phys. Rev. **D 73** (2006) 014516.
- [89] B. Kaufmann und L. Onsager, *Crystal Statistics. III. Short-Range Order in a Binary Ising Lattice*, Phys. Rev. **76** (1949) 1244.
- [90] T. Schultz, D. Mattis und E. Lieb, *Two-Dimensional Ising Model as a Soluble Problem of Many Fermions*, Rev. Mod. Phys. **36** (1964) 856.

Index

- 2-Zustandssystem, 63
- 3-Zustandssystem, 64
- 3/8-Regel, 35
- Ableitung
 - antisymmetrische, 283
- Akzeptanzrate, 61
- anharmonischer Oszillator, 67
- apriori-Mass, 189
- Attraktor, 208
- aussere Quelle, 89
- Autokorrelationszeit, 68
- Baker-Hausdorff Formel, 246
- Binomialverteilung, 40
- Blockkern, 223
- Blockspin, 222
- Blockspintransformation
 - Beispiel, 225
- Boltzmannfaktor, 111
- Brilloin-Zone, 99
- Brownsche Bewegung, 18
- Casimir scaling, 267
- chiral verbesserte Operatoren, 298
- chirale Symmetrie, 278
- chiraler Limes, 278
- Clustereigenschaft, 138
- Co-Rand, 195
- Co-Randoperator, 194
- constraint effective potential
 - in MFA, 128
- Curie-Temperatur, 105
- Curie-Weiss-Gesetz, 123
- Darstellung, 250
 - irreduzible, 251
- de Rham-Gruppen, 203
- Detailliertes Gleichgewicht, 61
- Determinante
 - eines Operators, 85
- Dezimierungsprozedur, 207
- Dichtematrix, 111
- Differenzenkalkul, 192
- Diffusionsgleichung, 16
- dimensionale Umwandlung, 233
- Divergenz einer 1-Kette, 197
- domain-wall Fermionen, 298
- duale Kopplung, 139
- Dualitat
 - fur 3d Ising-Modell, 180
- Dualitatsrelation
 - fur 1d Pottsmodelle, 150
- effektives Potential, 89, 90
 - in MFA, 128
- Eichfixierung, 183
- Eichpotential, 238
- Eichtheorie
 - $U(1)$, 253
 - \mathbb{Z}_2 , 252
- Eichtheorien
 - Euklidische, 243
 - im Kontinuum, 237
- Eichtransformation
 - in \mathbb{Z}_2 -Eichtheorie, 182

- Energie
 freie, 112
 innere, 113
- Energiedichte
 freie, 112, 136
 innere, 136
- Energielücke, 22
- Entropie, 114
- Entwicklung
 für Eichtheorien bei starker Kopplung,
 267
- Erwartungswert, 47
 in Spinmodellen, 112
- Erwartungswerte
 thermische, 83
- erzeugende Funktion, 25
 für Binomialverteilung, 41
- euklidische Feldoperatoren, 83
- exakte Sequenz, 204
- Extrapolation zum kritischen Punkt, 163
- Feldquantisierung, 2
- Feldstärke, 238, 239
- Fermionen
 naive auf Gitter, 287
- Ferromagnet, 105
- Feynman-Kac-Formel, 12, 14
- Feynman-Propagator, 84
- Fixpunkt, 213
 der RG-Transformation, 209, 216
- Fixpunkt-Operatoren, 298
- Flachengesetz, 259
- Form, 202
 exakte, 203
 geschlossene, 203
- Fouriertransformation
 diskrete, 285
- freie Energie, 21, 112
- freie Energiedichte
 für Skalarfeldtheorie, 83
- freie Energiefunktional
 variationelle Charakterisierung, 115
- Freie Felder, 81
- Fugazität, 147
- Funktionaldeterminante, 86
- Gamma-Matrizen
 Euklidische, 277
- Gapgleichung, 119
- Gaussche Integral
 für Fermionen, 280
- Gaussche Integrationsverfahren, 32
- Gesetz der großen Zahlen, 42, 43, 49
- Gibbs-Phänomen, 286
- Ginibre-Ungleichung, 190
- Ginsparg-Wilson Relation, 297
- Gitter, 135
 duales, 98, 174
 kubisches, 96
- Gitterableitung
 naive, 283
- Gitterableitungen, 282
- Gittereichtheorie
 Funktionalintegral, 247
 Wilson-Wirkung, 246
- Gittereichtheorien, 236
 ohne Materie, 243
 zweidimensionale, 252
- Gitterregularisierung
 für Skalarfeld, 95
- Gitterwirkung
 für Fermionen, 287
- GKS-Ungleichung (1), 189
- GKS-Ungleichung (2), 191
- Glueball, 269
- Gradient einer 0-Kette, 196
- Grassmann-Algebra, 279
- Grassmann-Integral, 281

- Grassmann-Integration, 279
 Grassmann-Variable, 279
 Grassmann-Variablen, 279
 Greenfunktion
 der Vorwärtsableitung, 283
 für antisymmetrische Ableitung, 284
 Grenzwertsatz, 42
 Gruppe
 endliche, 248

 Haar-Mas, 247, 252
 von $SU(2)$, 249
 Haarmas
 $SU(2)$, 250
 $U(1)$, 248
 Hamiltonoperator, 10
 Heisenberg-Bild, 10
 Heisenberg-Modell, 106, 109
 Heisenberggleichung, 10
 Higgs-Sektor, 81
 Higgsfeld, 81
 Hilbertraum, 10
 Hit-or-miss Monte Carlo, 40
 HMC-Algorithmus, 72
 hochdimensionale Integrale, 31
 Hochtemperatur-Fixpunkt, 209
 Hodgekomplex, 201
 Homologiegruppen, 203

 important sampling, 44
 Impulsoperator
 für Slac-Ableitung, 286
 innere Energie, 113
 innere Energiedichte, 219
 Interpolationspolynome, 33
 interpolierende Polynom, 33
 invariante Gruppenintegration, 247
 invariantes Mas, 247
 Inzidenzmatrix, 194

 irrelevante Störung, 217
 Ising-Kette, 134
 Ising-Modell, 105
 T_c in 2 Dimensionen, 176
 Energiefunktion, 108
 Hochtemperaturentwicklung für χ , 160
 Hochtemperaturentwicklung für Z , 160
 Tiefemperaturentwicklung für f , 169
 Tiefemperaturentwicklung für m_0 , 171
 Isingkette
 hohe Temperaturen, 156
 Nullstellen von Z , 148
 Simulation von, 151
 tiefe Temperaturen, 155
 Isingmodell, 105
 in 2 Dimensionen, 155
 tiefe Temperaturen, 166

 Jensen-Ungleichung, 76

 K-Funktional
 von Migdal, 262
 kanonische Zustandssumme, 20
 kanonisches Ensemble, 111
 Keplersche Fassregel, 35
 Kette, 194
 Kettengruppe, 194
 Klein-Gordon Gleichung, 82
 kompakte Variablen, 244
 Komplex
 dualer, 200
 Konfiguration, 107
 Kontinuumsimes, 228, 232
 für freies Skalarfeld, 228
 für Spinmodelle, 232
 naiver, in Gittereichtheorien, 246
 konvexe Hülle, 94
 Korrelationsfunktion, 113
 verbundene, 24

- Korrelationsfunktionen
 - in Quantenstatistik, 21
 - thermische, 21
- Korrelationslange, 138, 231
- Korrelationsungleichung, 189
- kovariante Ableitung, 237
- Kramers-Wannier Dualitat, 173
- kritische Exponent, 124
- kritische Exponenten, 219
 - fur Materialien, 220
- kritische Exponenten
 - fur Modelle, 221
- Krummung, 245
- Lagrange Polynome, 33
- Lagrangedichte
 - fur Abelsche Eichtheorie, 237
 - skalare Elektrodynamik, 238
- Laplace-Operator
 - auf dem Gitter, 288
- leap-frog Algorithmus, 74
- Lee-Yang-Nullstellen, 147
- Legendre-Transformation, 90, 91
- Leibniz-Regel
 - auf dem Gitter, 102
- Linksableitung, 282
- lokale Symmetrie, 182
- lokaler Operator, 299
- Luscher-Term, 259
- Magnetisierung, 113, 124, 136, 219
 - der Isingkette, 136
- marginale Störung, 217
- Markovprozess, 55
- Masse
 - physikalische, 231
- Matrix
 - stochastische, 55
- Matrizen
 - stochastische, 55
- Matsubara-Frequenzen, 85
- Maxwell-Konstruktion, 128
- MD-Methode, 72
- Mehrheitsregel, 225
- Mellin-Transformation, 86
- Metropolis-Algorithmus, 44
- Milne-Regel, 35
- minimale Kopplung, 238
- Mittelbildung, 248
- Mittelwert, 47
- Molekularfeldnaheung, 118
- Monte Carlo Iteration, 63
- Monte-Carlo Renormierung, 222
- nackte Masse, 231
- Newton-Cotes Integrationsverfahren, 32
- Nielsen-Ninomiya Theorem, 294
- Observablen
 - in reinen Eichtheorien, 257
- Oktaedergruppe, 271
- Ordnungsparameter, 124
- Oszillator
 - anharmonischer, 67
 - harmonischer, 25
- Overlap-Fermionen, 298
- Paralleltransport, 240
- Paralleltransporter, 241, 244
 - elementar, 244
- Paralltransport
 - auf dem Gitter, 244
- Peierls Argument, 183
- Peierls-Konturen, 187
- Peierls-Ungleichung, 184
- Percus-Ungleichung, 191
- Pfadintegral
 - Euklidisches, 15
 - in statistischer Mechanik, 20

- zu imaginären Zeiten, 19
- Pfadordnung, 241
- Phasenraum, 9
- Phasentransformation, 237
- Phasenübergänge, 105
- Plakettenvariable, 245
- Poisson-Klammer, 9
- Polyakov-Schleife, 253, 258
- Polyakovschleife, 253
- Polyakovschleifen, 263
- Polynome
 - Lagrangesche, 33
- Pottskette, 140
- Pottsmodelle, 108
- Programm
 - Renormierungsgruppe, 233
- Propagator
 - für freies Teilchen, 8, 12
 - für imaginäre Zeiten, 23
- Propagator für Skalarfeld, 98
- Quadratwurzelgesetz, 49
- Quantenelektrodynamik, 3
- Quantenoperator, 138
- Quantisierung
 - zweite, 2
- Randbedingungen
 - antiperiodische, 97
 - feste, 96
 - offene, 96
 - periodische, 96
- Randoperator, 194
- Rechteckregel, 35
- Rechtsableitung, 282
- relevante Störung, 217
- Renormierungsgruppe, 205
- Renormierungsgruppenabbildung, 214
- Renormierungsgruppenfluss, 215
- Renormierungsgruppentransformation, 209
 - für 2d Isingmodell, 210
 - für Ising-Kette, 206
- RG-Transformation
 - linearisierte, 216
- Riemannintegral, 32
- Riemannsche Summe, 32
- Riemannsche Zetafunktion, 88
- Rotor-Modell, 109
- Rückwärtsableitung, 97, 282
- Satz
 - von Frobenius, 145
 - von Lie, 12
 - von Perron und Frobenius, 145
 - von Peter-Weyl, 251
 - von Stokes, 197, 202, 242
 - von Trotter, 13
- Satz von Burnside, 272
- Satz von Chebyshev, 48
- Satz von Markov, 48
- Schrodingerbild, 11
- Schrodingergleichung, 11
- Schwingerfunktion, 89, 90
- Schwingerfunktional, 24, 84
- Schwingerfunktionen, 18
 - für Skalarfeld, 83
- Selbstkonsistenzgleichung, 119, 122
- Selektionswahrscheinlichkeit, 61
- Simlex, 193
- Simplex, 193, 202
 - orientierter, 193
- Simplizialkomplex, 193
- Simpsonregel, 35
- Skalarfeld, 82
- Skalarprodukt
 - invariantes, 250
- Skalenfeld, 218
- Skalengesetze, 218

- Skalenoperator, 218
- Skalenrelationen, 220
 - im engeren Sinne, 221
- Skalenverhalten
 - der freien Energiedichte, 217
- Slac-Ableitung, 284
- Spinmodell
 - diskretes, 105
 - kontinuierliches, 105
- Spinmodelle, 105, 134
 - Zustandssumme, 111
- Spinorfelder, 277
 - auf dem Gitter, 282
- Spinsysteme, 105
- spontane Magnetisierung, 113
- Spur
 - eines Operators, 86
- statistische Fluktuationen, 68
- stochastische Matrix
 - attraktive, 58
- Störungstheorie, 4
- Stringspannung, 258
- Suszeptibilität, 219
 - in der MFA, 123
- Tieftemperatur-Fixpunkt, 209
- Toeplitz-Matrix, 25
- Transfermatrix, 134, 135
 - 1d-Isingmodell, 135
 - für 1d-Pottsmodelle, 140
- Trapezregel, 35
- Trotter-Produktformel, 12
- Überlapp-Fermionen, 298
- ultralokaler Operator, 299
- Umfangsgesetz, 259
- Ungleichung
 - von Fenchel und Young, 93
- Universalität, 221
- Vakuum-Vakuum Amplitude, 82
- Vakuumerwartungswert, 18
- Variationsprinzip, 82
- Vektor
 - stochastischer, 56
- verbesserte Gitterwirkungen, 247
- Verdopplungsproblem, 287, 290
- Verzweigungsregeln, 273, 274
- Virialsatz, 69
- Vorwärtsableitung, 97, 282
- Würfelgruppe, 271
- Wärmeleitungskern, 86
- Wegordnung, 241
- Wickdrehung, 15
- Wiener-Mas, 15
- Wightmanfunktionen, 18, 83
- Wilso-Schleifen, 182
- Wilson Fermionen, 290
- Wilson-Parameter, 290
- Wilson-Schleife, 258
- Wilsonschleife, 182
- Wurfelgruppe, 271
- Yang-Mills Term, 240
- zeitgeordnetes Produkt
 - von Feldoperatoren, 82
- Zelle, 193, 202
- Zellkomplex, 193
- Zentrumssymmetrie, 265
- Zeta-Funktion, 86
- zirkulante Matrix, 282
- Zufallsvariable, 47
- Zufallsvariablen
 - unabhängige, 47
- Zustandssumme, 20, 111
 - eindimensionales Isingmodell, 135
 - für 1d Pottsmodelle, 141
 - für Skalarfeldtheorie, 83

- von $U(1)$ -Gittereichtheorie, 248
- Zweipunktfunktion
 - des dualen Ising-Modells, 178
 - verbundene, 22
 - verbundene, 23
- Zyklus, 203