

Quantenfeldtheorie II

Prof. A. Wipf

Theoretisch-Physikalisches-Institut

Friedrich-Schiller-Universität, Max Wien Platz 1

07743 Jena

2. Auflage, Wintersemester 2005/06

Inhaltsverzeichnis

1	Einführung	1
1.1	Literaturempfehlungen:	4
2	Pfadintegrale	6
2.1	Wiederholung der Quantenmechanik	8
2.2	Feynman-Kac Formel	11
2.3	Euklidisches Pfadintegral	14
2.3.1	Quantenmechanik für imaginäre Zeiten	14
2.3.2	Das Pfadintegral für imaginäre Zeiten	18
2.3.3	Pfadintegrale in der statistischen Mechanik	19
2.3.4	Korrelationsfunktionen in der Quantenstatistik	20
2.4	Anhang A: Der harmonische Oszillator	23
2.5	Aufgaben	25
3	Monte Carlo Simulationen	27
3.1	Hochdimensionale Integrale	27
3.1.1	Numerische Algorithmen	28
3.1.2	Monte-Carlo Integration	33
3.2	Metropolis Algorithmus	38
3.3	Markovprozesse	41
3.4	Detailliertes Gleichgewicht	46
3.4.1	Akzeptanzrate	47
3.4.2	Hasting und Metropolis Methode	47
3.4.3	Wärmebad-Methode	50
3.5	Anharmonischer Oszillator	51
3.6	Programme zu Kapitel 3	56
3.6.1	Headerdateien	63
3.7	Anhang B: Wahrscheinlichkeiten	65
3.8	Aufgaben	67

4	Spinketten	69
4.1	Isingartige Spinmodelle	69
4.2	Ising-Kette	73
4.2.1	Transfermatrix	74
4.2.2	Satz von Frobenius	77
4.2.3	Verhalten bei tiefen und hohen Temperaturen	78
4.2.4	Nullstellen der Zustandssumme	81
4.3	Pottsmodelle	84
4.4	Simulation des $1d$ Ising Modells	87
4.5	Aufgaben	91
5	Approximationen	92
5.1	Molekularfeldnäherung	92
5.2	Hochtemperaturentwicklungen	98
5.3	Tieftemperaturentwicklungen	106
5.4	Aufgaben zu Kapitel 5	112
6	Exakte Resultate	113
6.1	Dualität für das $2d$ Ising-Modell	113
6.2	Dualität für das $3d$ Ising-Modell	119
6.3	Peierls Argument	123
6.4	Korrelationsungleichungen	128
6.5	Anhang C: Differenzenkalkül	131
7	Renormierungsgruppe	143
7.1	Ising-Modelle	144
7.1.1	Ising-Kette	144
7.1.2	Das zweidimensionale Modell	148
7.2	Fixpunkte	151
7.2.1	Herleitung der Skalengesetze	156
7.3	Blockspintransformation	159
8	Skalarfelder	168
8.1	Quantisierung des Skalarfelds	169
8.1.1	Das freie Feld bei endlichen Temperaturen	171
8.2	Effektive Potentiale	174
8.2.1	Konventionelles effektives Potential	175
8.2.2	Die Legendre-Transformation	176
8.2.3	Effektives Potential in der Quantenmechanik	180
8.2.4	Contraint effective potential	182

8.3	Schleifenentwicklung für $\Gamma[\varphi]$	184
8.3.1	Klassischer Beitrag	186
8.3.2	Einschleifen-Beitrag	186
9	Skalares Gitterfeld	190
9.1	Das freie Skalarfeld	191
9.1.1	Fehlende Leibniz-Regel auf dem Gitter	193
9.2	2-Punktfunktion als Wegintegral	194
9.3	Molekularfeldnäherung	196
9.4	Kontinuumsliches für freies Feld	202
9.5	Kontinuumsliches für Spinmodelle	205
9.6	Programme zu Kapitel 9	206
10	Spinorfelder	209
10.1	Grassmann Variablen	210
10.2	Spinorfelder auf dem Gitter	212
10.2.1	Gitterableitungen	212
10.2.2	Naive Fermionen auf dem Gitter	217
10.2.3	Wilson-Fermionen	220
10.3	Das Nielsen-Ninomiya Theorem	223
10.4	Ginsparg-Wilson Relation	225
10.4.1	Weitere Vorschläge	228
10.5	Programme zu Kapitel 10	229
11	Reine Gittereichtheorien	231
11.1	Eichtheorien im Kontinuum	231
11.1.1	Paralleltransport	235
11.2	Eichtheorien auf dem Gitter	237
11.2.1	Eine Wirkung für reine Eichtheorien	238
11.2.2	Invariantes Maß und irreduzible Darstellungen	240
11.2.3	Zustandssummen von zweidimensionalen Modellen	244
11.2.4	Observablen der reinen Eichtheorien	248
11.2.5	Die Strings Spannung	249
11.3	Starke Kopplungsentwicklung	251

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 zum Beispiel die Teilchenerzeugung 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 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 LAGRANGE-Funktion 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 KLEINGORDON-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 Wechselwirkungsichte 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-genannte 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 Fein-

strukturkonstante $\alpha = e^2/\hbar c \sim 1/137$ 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 FERMI 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 Kontinuumslimit 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*, McGraw-Hill, 1980.

P. Becher, M. Böhm und H. Joos, *Eichtheorien*, Teubner Taschenbücher, 1981; 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.

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

Istvan Montvay und Gernot Münster, *Quantum Fields on a Lattice*, Cambridge University Press, 1994.

H.J. Rothe, *Lattice Gauge Theories - An Introduction*, World Scientific Lecture Notes in Physics, Vol. 43, 1996.

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 Amplitude 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 ist. Der Exponent ist dimensionslos, da \hbar die Dimension einer Wirkung hat. Für ein freies Teilchen mit HAMILTON- und LAGRANGE-Funktion

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

kann man die obige Formel leicht nachprüfen. Freie Teilchen bewegen sich längs Geraden und die Bahn ist

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

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 Orts- oder Koordinatendarstellung 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,

$$\int du K_0(t, q', u) K_0(s, u, q) = K_0(t+s, q', q). \quad (2.5)$$

Auf diese Art 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 solche Systeme zu verallgemeinern [8]. Er fand eine alternative Formulierung der Quantenmechanik, aufbauend auf der Tatsache, dass der Propagator als Summe über *alle gewichteten Wege* (und nicht nur klassische Wege) vom Anfangs- zum Endpunkt 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 aber über reelle und positive Wahrscheinlichkeiten für individuelle Wege summiert und nicht über komplexe Amplituden. Das WIENERSche Funktionalintegral entspricht dem FEYNMANSchen Wegintegral für „imaginäre Zeiten“. Die Wegintegralmethode gestattet eine einheitliche Sichtweise auf die Quantenmechanik, Quantenfeldtheorie und die statistische Mechanik und ist ein unersetzliches Werkzeug in der modernen theoretischen Physik. Sie ist ein alternativer Zugang zur HAMILTONschen Methode für die „Quantisierung“ klassischer Systeme.

Die Weg-, Pfad- oder Funktionalintegralmethode feierte erste große Erfolge in den 1950er Jahren und ist sehr schön und verständlich dargestellt in FEYNMAN'S ursprünglichen Arbeit [8] und in seinem Buch mit HIBBS [14]. 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 prominentes 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 Operato-

ren auf einem HILBERT-Raum 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 von nicht explizit zeitabhängigen Observablen ist im HEISENBERG-Bild gegeben durch

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

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 HAMILTON-Operator

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{V}, \quad \text{mit} \quad H_0 = \frac{1}{2m} \sum \hat{p}_i^2 \quad (2.13)$$

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 HILBERT-Raum \mathcal{H} , dessen Elemente die Systemzustände charakterisieren, dargestellt,

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

Für ein sich längs einer Geraden bewegendes Teilchen ist der HILBERT-Raum $\mathcal{H} = L_2(\mathbb{R})$ und in der Ortsdarstellung

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

In Experimenten werden Matrixelemente von Observablen gemessen, z.B. der Erwartungswert eines Operators in einem gegebenen Zustand, $\langle\psi|O(t)|\psi\rangle$ (im Folgenden schreiben wir den Hut über den Operatoren nicht mehr). Die Zeitabhängigkeit von Erwartungswerten folgt aus den HEISENBERG-Gleichungen (2.12).

Oft wird eine (zeitabhängige) Ähnlichkeitstransformation vom HEISENBERG- in das

SCHRÖDINGER-Bild ausgeführt,

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

Insbesondere gilt $H_s = H$ und Observablen werden zeitunabhängig,

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

Mit (2.17) findet man für die Erwartungswerte

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

Nach der Transformation $\{O(t), |\psi\rangle\} \longrightarrow \{O_s, |\psi_s(t)\rangle\}$ ins Schrödinger-Bild entwickeln sich die Zustände gemäß der Schrödinger-Gleichung

$$i\hbar \frac{d}{dt} |\psi_s\rangle = H |\psi_s\rangle. \quad (2.19)$$

In der Ortsdarstellung hat die formale Lösung

$$|\psi_s(t)\rangle = e^{-itH/\hbar} |\psi_s(0)\rangle \quad (2.20)$$

die Form

$$\begin{aligned} \psi_s(t, q') \equiv \langle q' | \psi_s(t) \rangle &= \int \langle q' | e^{-itH/\hbar} | q \rangle \langle q | \psi_s(0) \rangle dq \\ &\equiv \int K(t, q', q) \psi_s(0, q) dq. \end{aligned} \quad (2.21)$$

Wir haben die Vollständigkeitsrelation

$$\int dq |q\rangle \langle q| = \mathbb{1} \quad (2.22)$$

benutzt und den Kern für die unitäre Zeitentwicklung

$$K(t, q', q) = \langle q' | e^{-itH/\hbar} | q \rangle \quad (2.23)$$

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

$$K(t, q', q) \equiv \langle q', t | q, 0 \rangle. \quad (2.24)$$

Diese Amplitude erfüllt die zeitabhängige SCHRÖDINGER-Gleichung

$$i\hbar \frac{d}{dt} K(t, q', q) = H K(t, q', q), \quad (2.25)$$

wobei H auf q' wirkt, und die Anfangsbedingung

$$\lim_{t \rightarrow 0} K(t, q', q) = \delta(q' - q). \quad (2.26)$$

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

$$K_0(t, q', q) = \langle q' | e^{-itH_0/\hbar} | q \rangle = \left(\frac{m}{2\pi i \hbar t} \right)^{d/2} e^{im(q'-q)^2/2\hbar t}, \quad q, q' \in \mathbb{R}^d. \quad (2.27)$$

Speziell in einer Dimension ist

$$K_0(t, q', q) = \left(\frac{m}{2\pi i \hbar t} \right)^{1/2} e^{im(q'-q)^2/2\hbar t}. \quad (2.28)$$

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

2.2 Feynman-Kac Formel

In diesem Abschnitt leiten wir die FEYNMANSche Pfadintegraldarstellung für den unitären Operator $\exp(-iHt)$ und die KACsche 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

$$\|S_n\|, \|T_n\| \leq e^{(\|A\|+\|B\|)/n} \equiv a^{1/n},$$

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*

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

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

$$e^{-\tau(A+B)} = s - \lim_{n \rightarrow \infty} (e^{-\tau A/n} e^{-\tau B/n})^n. \quad (2.30)$$

Der starke Limes bedeutet, dass die Konvergenz für alle Zustände $\psi \in \mathcal{D}$ gilt. Die Formel (2.29) wird in der Quantenmechanik gebraucht, die Formel (2.30) 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 (2.29) auf (2.23) an. Mit $\epsilon = t/n$ und $\hbar = 1$ erhalten wir

$$\begin{aligned} K(t, q', q) &= \lim_{n \rightarrow \infty} \langle q' | (e^{-i\epsilon H_0} e^{-i\epsilon V})^n | q \rangle \\ &= \lim_{n \rightarrow \infty} \int dq_1 \cdots dq_{n-1} \prod_{j=0}^{j=n-1} \langle q_{j+1} | e^{-i\epsilon H_0} e^{-i\epsilon V} | q_j \rangle, \end{aligned} \quad (2.31)$$

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

$$\langle q_{j+1} | e^{-i\epsilon H_0} e^{-i\epsilon V} | q_j \rangle = \langle q_{j+1} | e^{-i\epsilon H_0} | q_j \rangle e^{-i\epsilon V(q_j)}. \quad (2.32)$$

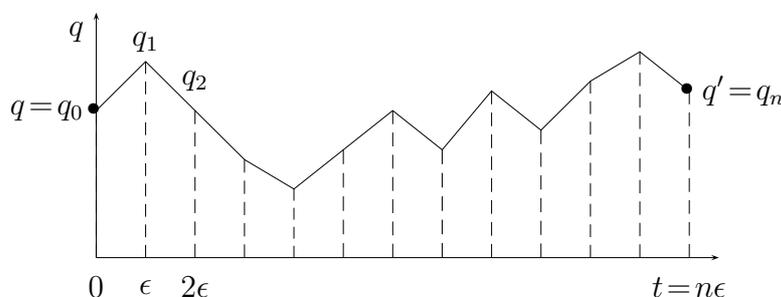
Jetzt setzen wir für den Propagator des freien Teilchens mit HAMILTON-Operator H_0 das

Resultat (2.27) ein. Es folgt

$$K(t, q', q) = \lim_{n \rightarrow \infty} \int dq_1 \cdots dq_{n-1} \left(\frac{m}{2\pi i \epsilon} \right)^{n/2} \cdot \exp \left\{ i \epsilon \sum_{j=0}^{j=n-1} \left[\frac{m}{2} \left(\frac{q_{j+1} - q_j}{\epsilon} \right)^2 - V(q_j) \right] \right\}. \quad (2.33)$$

Diese FEYNMAN-KAC-Formel ist nun die gesuchte *Pfadintegral*-Darstellung für den Zeitentwicklungskern.

Um zu sehen, warum die rechte Seite Pfadintegral 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 der Länge t in n gleich lange Intervalle der Länge $\epsilon = t/n$ und identifizieren q_k mit $q(s = k\epsilon)$. Dann kann der Exponent in (2.33) als RIEMANNsche Summe interpretiert werden, und zwar für die klassische Wirkung eines sich längs des stückweise geraden Weges bewegenden Punktteilchens,

$$\sum_{j=0}^{j=n-1} \epsilon \left[\frac{m}{2} \left(\frac{q_{j+1} - q_j}{\epsilon} \right)^2 - V(q_j) \right] \sim \int_0^t ds \left[\frac{m}{2} \left(\frac{dq}{ds} \right)^2 - V(q(s)) \right]. \quad (2.34)$$

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 Kontinuumsliches $n \rightarrow \infty$ 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

$$\left(\frac{m}{2\pi i \epsilon} \right)^{n/2} = C \quad (2.35)$$

mit einer Konstanten C , welche zu einem unitären Zeitentwicklungskern Anlass gibt, dann

finden wir

$$K(t, q', q) = C \int_{q(0)=q}^{q(t)=q'} \mathcal{D}q e^{iS[q]/\hbar}. \quad (2.36)$$

Das formale Maß $\mathcal{D}q$ ist über den Grenzprozess (2.33) erklärt. Da das unendliche Produkt von LEBESQUE-Maßen 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 (2.36) 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

Die oszillierenden Integranden $\exp(iS)$ im Pfadintegral (2.36) führen auf Distributionen. Falls es gelingen würde, diese 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 ein Maß auf allen Pfaden streng konstruiert werden und die Konstruktion führt auf das WIENER Maß. Mit einer sogenannten WICK-Drehung wird also t zu imaginären Zeiten analytisch fortgesetzt. Bei der inversen WICK-Drehung rotiert man wieder zurück zu reellen Zeiten. In der Praxis ersetzt man im Pfadintegral (2.36) 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

$$U(t) = e^{-iHt} = \int e^{-iEt} dP_E, \quad (2.37)$$

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 Eigenraum. Wir wollen annehmen, dass der HAMILTON-Operator nach unten beschränkt ist. Dann können wir eine Konstante addieren, so dass $H \geq 0$ ist und das Integral (2.37) von 0 bis ∞ geht. Jetzt ersetzen wir

$t \rightarrow t - i\tau$ mit dem Resultat

$$e^{-(\tau+it)H} = \int_0^\infty e^{-E(\tau+it)H} dP_E. \quad (2.38)$$

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

$$\{t - i\tau \in \mathbb{C}, \tau \geq 0\}. \quad (2.39)$$

Kennen wir den Operator (2.38) 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 SCHRÖDINGER-Gleichung

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

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

Für imaginäre Zeiten sind die „Entwicklungsoperatoren“

$$U(\tau) = e^{-\tau H} \quad (2.40)$$

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“ unmöglich. $U(\tau)$ erfüllt eine *Diffusionsgleichung*,

$$\frac{d}{d\tau} U(\tau) = -HU(\tau), \quad (2.41)$$

und der Kern

$$K(\tau, q', q) = \langle q', \tau | q, 0 \rangle = \langle q' | e^{-\tau H} | q \rangle \quad \text{mit} \quad K(0, q', q) = \delta(q', q), \quad (2.42)$$

ist reell für reelle HAMILTON-Operatoren¹. Der Kern ist strikt positiv:

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

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

wesentlich selbstadjungiert. Dann ist

$$\langle q' | e^{-\tau H} | q \rangle > 0. \quad (2.43)$$

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 und den harmonischen Oszillator in d Dimensionen und für imaginäre Zeiten

$$K_0(\tau, q', q) = \left(\frac{m}{2\pi\tau} \right)^{d/2} e^{-m(q'-q)^2/2\tau} \quad (2.44)$$

und

$$K_\omega(\tau, q', q) = \left(\frac{m\omega}{2\pi \sinh \omega\tau} \right)^{d/2} \exp \left\{ -\frac{m\omega}{2} \left[(q'^2 + q^2) \coth \omega\tau - \frac{2q'q}{\sinh \omega\tau} \right] \right\}, \quad (2.45)$$

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

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

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

$$C \cdot \int dq \langle q, \tau | 0, 0 \rangle = C \cdot \int dq K(\tau, q, 0) = 1, \quad (2.47)$$

und diese Forderung legt C fest. Speziell für ein freies Teilchen ist

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

die Wahrscheinlichkeitsdichte für die BROWNSche Bewegung mit Diffusionskoeffizient $D = 1/2m$.

Vakuumerwartungswerte der Feldoperatoren sind von herausragendem Interesse in einer Quantentheorie. In der Quantenmechanik haben diese WIGHTMAN-Funktionen die Form

$$W^{(n)}(t_1, \dots, t_n) = \langle 0 | q(t_1) \cdots q(t_n) | 0 \rangle, \quad q(t) = e^{itH} q e^{-itH}. \quad (2.48)$$

Diese Funktionen ändern sich bei Austausch zweier Argumente, da die Ortsoperatoren

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

zu verschiedenen Zeiten im Allgemeinen nicht vertauschen. Wir dürfen wieder annehmen, dass die Energie des Grundzustandes $|0\rangle$ verschwindet. Nun setzen wir die WIGHTMAN-Funktionen zu komplexen Zeiten $z_i = t_i - i\tau_i$ fort,

$$W^{(n)}(z_1, \dots, z_n) = \langle 0 | q e^{-i(z_1 - z_2)H} q e^{-i(z_2 - z_3)H} q \dots q e^{-i(z_{n-1} - z_n)H} q | 0 \rangle. \quad (2.49)$$

Wir haben benutzt, dass H den Grundzustand annihiliert und deshalb $\exp(i\zeta H) |0\rangle = |0\rangle$ ist und müssen fordern, dass die Imaginärteile der z_k geordnet sind,

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

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

$$\tau_1 > \tau_2 \dots > \tau_n. \quad (2.50)$$

Die WIGHTMAN-Funktionen für reelle Zeiten sind also die Randwerte der analytischen WIGHTMAN-Funktionen für komplexe Argumente

$$W^{(n)}(t_1, \dots, t_n) = \lim_{\substack{\Im z_i \rightarrow 0 \\ \Im(z_{k+1} - z_k) > 0}} W^{(n)}(z_1, \dots, z_n). \quad (2.51)$$

Die Funktionen mit imaginären Argumenten heißen SCHWINGER-Funktionen,

$$\begin{aligned} S^{(n)}(\tau_1, \dots, \tau_n) &= W^{(n)}(-i\tau_1, \dots, -i\tau_n) \\ &= \langle 0 | q e^{-(\tau_1 - \tau_2)H} q e^{-(\tau_2 - \tau_3)H} q \dots q e^{-(\tau_{n-1} - \tau_n)H} q | 0 \rangle. \end{aligned} \quad (2.52)$$

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-WIGHTMAN-Funktion hängt nur von der Zeitdifferenz $t_1 - t_2$ ab,

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

$$= \frac{1}{2m\omega} \langle 1 | e^{-it\omega a^\dagger a} | 1 \rangle = \frac{e^{-i\omega(t_1-t_2)}}{2m\omega},$$

und die zugehörige SCHWINGER-Funktion hat die Form

$$S^{(2)}(\tau_1 - \tau_2) = \frac{e^{-\omega(\tau_1 - \tau_2)}}{2m\omega}. \quad (2.53)$$

In einer relativistischen Quantenfeldtheorie sind die SCHWINGER-Funktionen $S^{(n)}$ invariant unter der EUKLIDischen LORENTZgruppe $SO(4)$ und deshalb ist $S^{(n)}(x_1, \dots, x_n)$ 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 (2.30) aus der Formel (2.28) hervorgeht, wenn man it durch τ ersetzt. Genauso wie im kanonischen Zugang dreht man die reelle Zeit t mit einer WICK-Rotation 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 (2.33) analoge Formel für die EUKLIDische Zeit τ beweisen. Die einzige Änderung ist die Ersetzung von $i\epsilon$ durch ϵ . Man findet

$$K(\tau, q', q) = \langle q' | e^{-\tau H/\hbar} | q \rangle = \lim_{n \rightarrow \infty} \int dq_1 \cdots dq_{n-1} \left(\frac{m}{2\pi\hbar\epsilon} \right)^{n/2} e^{-S_E(q_0, q_1, \dots, q_n)/\hbar}$$

mit $S_E(\dots) = \epsilon \sum_{j=0}^{n-1} \left\{ \frac{m}{2} \left(\frac{q_{j+1} - q_j}{\epsilon} \right)^2 + V(q_j) \right\},$ (2.54)

wobei wiederum $q_0 = q$ 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 reellwertige 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 (2.54) 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 Kontinuumslimites $n \rightarrow \infty$ wird die rechte Seite in (2.54) zu einem EUKLIDischen Pfadintegral mit EUKLIDischer Wirkung

$$S_E[q] = \int_0^\tau d\sigma \left[\frac{1}{2} m \dot{q}^2 + V(q(\sigma)) \right] \quad (2.55)$$

und reeller Dichte

$$K(\tau, q', q) = \langle q', \tau | q, 0 \rangle = C \int_{q(0)=q}^{q(\tau)=q'} \mathcal{D}q e^{-S_E[q]/\hbar}. \quad (2.56)$$

Die Kerne für das freie Teilchen und den harmonischen Oszillator wurden bereits in (2.44) und (2.45) 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 (2.56) hat, ist gerade die kanonische *Zustandssumme* zur Temperatur $T = \hbar/\tau$ oder zur inversen Temperatur β ,

$$Z(\beta) = \text{tr} e^{-\beta H} = \sum e^{-\beta E_n} = \int dq K(\hbar\beta, q, q), \quad \beta = \frac{1}{T}. \quad (2.57)$$

Wegen $q = q'$ im letzten Term wird im Pfadintegral nur über periodische Wege von q nach q integriert und wegen der zusätzlichen dq -Integration über *alle periodischen* Wege. Im Folgenden setzen wir wieder $\hbar = 1$.

Für den harmonischen Oszillator ist

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

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 (2.57), 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 sehr positive β , d.h. für sehr tiefe Temperaturen, wird die Summe (2.57) vom Beitrag des Grundzustandes dominiert, und entsprechend konvergiert die *freie Energie* gegen die Grundzustandsenergie,

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

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,

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

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

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

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

wie folgt gewinnen: Zur Berechnung der Spur verwenden wir die orthornormierten Energie-

Eigenzustände $|n\rangle$ und schieben den Einheitsoperator $\mathbb{1} = \sum |n\rangle\langle n|$ 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 SCHWINGER-Funktion 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

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

so dass die verbundene Zweipunktfunktion

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

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

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

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 FEYNMAN-Graphen 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,

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

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

(2.56) hat. Wir schieben zweimal die Eins ein, so dass

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

Setzen wir für die Propagatoren das Resultat (2.56) 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 $q \rightarrow q'$ zu summieren ist und nicht nur über Wege die zur Zeit τ_2 durch u gehen und zur Zeit τ_1 durch v . 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 seinen Argumenten ist, müssen wir die auf der linken Seite die Zeitordnung einschieben. Wir erhalten die Zeitordnung natürlich auch, wenn wir die obige Rechnung für $\tau_2 > \tau_1$ wiederholen würden.

Die *verbundenen Korrelationsfunktionen* werden vom SCHWINGER-Funktional erzeugt, also dem Logarithmus der Zustandssumme

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

Für ein konservatives System und eine zeitunabhängige Quelle j ist W proportional zur freien Energie. Die verbundenen Korrelationsfunktionen erhält man durch funktionale Ableitungen des SCHWINGER-Funktional,

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

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,

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

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

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

eingeführt. Dies ist eine TOEPLITZ-Matrix die auf jeder Nebendiagonalen dieselben Elemente hat. Diese Eigenschaft folgt aus der Invarianz der Wirkung unter Gittertranslationen.

Zur Berechnung von Momenten ist es vorteilhaft, die *erzeugende Funktion*

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

zu berechnen. Hier haben wir die als bekannt vorausgesetzte Formel für GAUSSsche 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

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

verschwinden für $m > 2$. Die einzige nicht-verschwindene 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

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

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 (3.90) im nächsten Kapitel unter $E_0(\text{exakt})$ zu finden.

2.5 Aufgaben

Aufgabe 1: Harmonischer Oszillator

Im Folgenden leiten Sie den Kern des Zeitentwicklungsoperators des harmonischen Oszillators

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

ab, wobei wir zur Vereinfachung $\hbar = \omega = m = 1$ gesetzt haben. Der Kern ist definiert als $K(t, q', q) = \langle q' | e^{-iHt} | q \rangle$. Drücken Sie den Kern mittels Eigenfunktionen des Hamiltonoperators aus und benutzen Sie folgende Formel (die man in einer Formelsammlung finden kann)

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

um das Ergebnis aus der Vorlesung zu erhalten (dabei sind H_n die Hermitefunktionen, d.h. die Eigenfunktionen des Hamiltonoperators).

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

Aufgabe 2: 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.

Aufgabe 3: Verbundene/Unverbundene Korrelationsfunktionen

In der Vorlesung wurde folgende Formel für die unverbundenen Korrelationsfunktionen abgeleitet:

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

Nehmen Sie an, dass in der (euklidischen) LAGRANGE-Dichte $\mathcal{L}_E(q, \dot{q}) = \frac{1}{2}\dot{q}^2 + V(q)$ das Potential gerade ist, d.h. $V(-q) = V(q)$ gilt.

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

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

Kapitel 3

Monte Carlo Simulationen

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,

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

und der in (2.54) eingeführten 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 der Gitterapproximation zur Quantenstatistik oder EUKLIDischen Quantenmechanik muss man hochdimensionale Integrale berechnen. Hier sind effiziente numerische Algorithmen gefragt, die das Integral bis auf einen abschätzbaren Fehler berechnen. Diese müssen dem jeweiligen Problem angepasst werden.

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-artige Integrationsregeln) und Formeln, welche den Integrand 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,

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

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 :

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

Das interpolierende Polynom vom Grade m ist dann

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

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*

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

Aufgrund des Satzes ergibt sich für das Integral $\int dx f(x)$ von der kleinsten Stützstelle x_0 bis zur größten Stützstelle x_m die Formel

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

Die γ_p bzw. x_p heißen *Gewichte* bzw. *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 $x = x_0 + ht$, $t \in [0, m]$ die Gewichte

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

Aus der Definition und $\sum_p \gamma_p^{(m)} = 1$ folgt nach Integration für jedes m

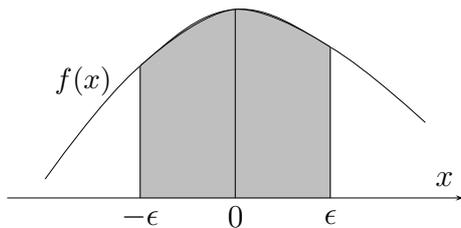
$$w_0^{(m)} + w_1^{(m)} + \dots + w_m^{(m)} = m \quad \text{und} \quad w_p^{(m)} = w_{m-p}^{(m)}. \quad (3.10)$$

Die NEWTON-COTES-Formeln lauten nun

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

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:

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

Die Integration ergibt die Fehlerabschätzung

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

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

Mittelwertsatz anwenden,

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

und es folgt die bessere Abschätzung

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

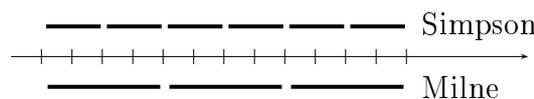
Hieraus ergibt sich die bemerkenswerte Tatsache, dass durch die KEPLERSche Fassregel sogar kubische Polynome exakt integriert werden. Für die anderen Verfahren erhält man analoge Fehlerschranken für das Integral von der kleinsten bis zur größten Stützstelle ($M_m = \sup_{[x_0, x_m]} |f^{(m)}|$):

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 zwischen grossen Zahlen und auch deshalb werden die NEWTON-COTES-Verfahren höherer Ordnung in der Praxis 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 SIMPSON-Verfahren die KEPLERSche Fassregel auf Doppelintervalle angewandt.



Wir betrachten die zusammengesetzte SIMPSON-Regel etwas näher. Das Integrationsin-

tervall $[a, b] = [x_0, x_{2n}]$ 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

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

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

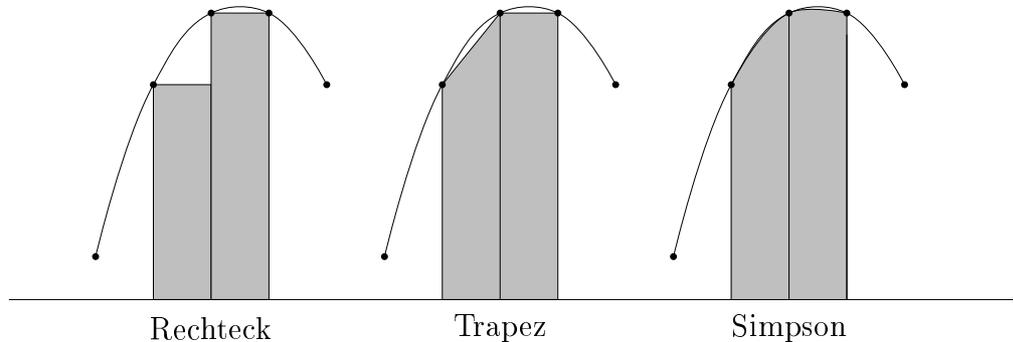
$$\left| \int_a^b f(x) dx - S_m(f) \right| \leq \frac{b-a}{m\epsilon} E_m(\epsilon) \quad (3.17)$$

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

Mit einem Programm berechnen wir das Integral einer Funktion über das Intervall $[a, b]$ und zwar auf vier Arten: mit dem Rechteck-, Trapez- und SIMPSON-Verfahren sowie mit Hilfe der Monte-Carlo Methode. Das letzte Verfahren wird weiter unten besprochen. Nochmals zur Erinnerung:

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

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



Das Programm `1dintegral.c` auf Seite 56 berechnet das Integral $\int \exp(x)$ von 0 bis 1 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 SIMPSON-Verfahren konvergiert wie erwartet die Näherung sehr schnell gegen den exakten Wert 1.7182818.

$\log_{10} M$	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 Integration* ist eine alternative Integrationsmethode.

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. This was already possible to envisage with the beginning of the new era of fast computers, and I immediately thought of problems of neutron diffusion and other questions of mathematical physics, and more generally how to change processes described by certain differential equations into an equivalent form interpretable as a succession of random operations. Later ...[in 1946, I] described the idea to John von Neumann, and we began to plan actual calculations.

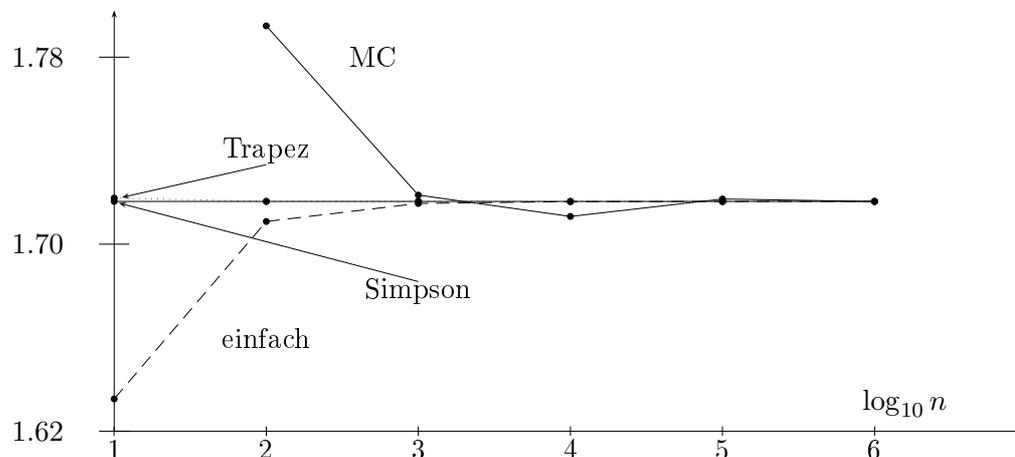
Einige Jahre später wurde die Methode auf das Neutronendiffusionsproblem angewandt, das mit anderen Methoden nicht unlösbar schien [25]. Eine wichtige Anwendung ist die Berechnung hochdimensionaler Integrale. Ein sehr einfacher Algorithmus wäre:

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

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

Für eine RIEMANN-integrierbare Funktion konvergiert $I(M)$ für große M gegen das Integral von 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.

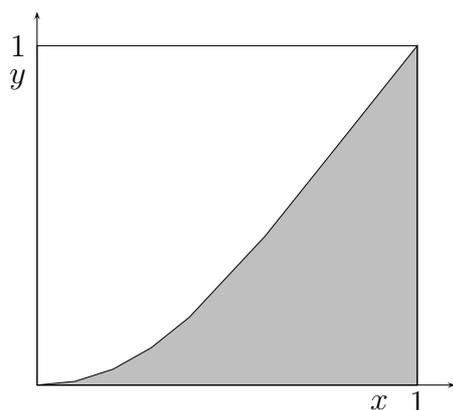


Für die Exponentialfunktion liefert die Methode von SIMPSON schon für zehn Intervalle das richtige Resultat $e - 1$ bis auf die 6. Stelle hinter dem Komma. Problematisch werden die Standardverfahren (Trapezregel, Simpsonregel), wenn die Dimension n des Integrals

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

gross wird. Sind 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 einer groben Einteilung des Intervalls $[0, 1]$ entspricht, so ist die Zahl der Stützstellen $\sim 10^n$. Die Auswertung einer Stützstelle dauert etwa 10^{-7} s auf einem modernen PC. Für ein 12-faches Integral braucht man dann bereits mehr als einen Tag.

Hit-or-miss Monte Carlo: Gesucht sei wieder der Wert des Integrals $I = \int f(x)$,



wobei wir ohne Beschränkung der Allgemeinheit annehmen dürfen, dass wir von 0 bis 1 integrieren. Aus einem Zufallsgenerator, der zwischen 0 und 1 gleichverteilte Zufallszahlen liefert, werden zwei Zufallszahlen entnommen,

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

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

$$p = \frac{\text{Anzahl günstiger Fälle}}{\text{Anzahl der möglichen Fälle}} = \frac{\text{dunkle Fläche}}{\text{Gesamtfläche}} = \frac{I}{1} = I. \quad (3.21)$$

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

$$P(M, k) = \binom{M}{k} p^k (1-p)^{M-k}, \quad k = 0, 1, \dots, M. \quad (3.22)$$

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 Möglichkeiten, aus M Versuchen k auszuwählen. Als Funktion von $x = k/M \in [0, 1]$ beschreibt $P(M, x)$ eine bei p lokalisierte Glockenkurve, die mit zunehmendem M schmaler

wird. Die erzeugende Funktion der Binomialverteilung ist

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

Erwartungswerte von beliebigen Potenzen von k können durch ableiten dieser Funktion gewonnen werden. Die Summe der Wahrscheinlichkeiten ist gleich Eins,

$$\langle 1 \rangle = \sum_{k=0}^M P(M, k) = Z(0) = (p + (1-p))^M = 1, \quad (3.24)$$

und wie erwartet, ist der mittlere Anteil Treffer

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

Das Quadrat der Streuung um den Ursprung lautet

$$\left\langle \frac{k^2}{M^2} \right\rangle = \frac{1}{M^2} \sum_{k=0}^M k^2 P(M, k) = \frac{1}{M^2} \frac{d^2 Z}{dt^2} \Big|_{t=0} = \frac{p}{M} + \left(1 - \frac{1}{M}\right) p^2. \quad (3.26)$$

Für das Quadrat der Streuung um die mittlere Anzahl Treffer findet man

$$\sigma^2 = \frac{1}{M^2} \langle (k - \langle k \rangle)^2 \rangle = \frac{p(1-p)}{M}. \quad (3.27)$$

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

$$I = \int_0^1 f(x), \quad f(x) = \frac{x^2 e^x}{1-x+x e^x}. \quad (3.28)$$

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 57 generiert. Die grobe Hit-or-Miss Methode kann leicht verbessert werden. Wenn nämlich p gegen 1 oder 0 strebt so wird σ sehr klein (allerdings wird für $p \rightarrow 0$ der relative Fehler gross). Wir nehmen nun eine Hilfsfunktion $g(x)$ die $f(x)$ approximiert und analytisch integriert werden kann. Ist das erste Integral

in

$$I = \underbrace{\int (f(x) - g(x)) dx}_{p \text{ wird klein}} + \underbrace{\int g(x) dx}_{\text{bekannt}} \quad (3.29)$$

klein und der Integrand zwischen 0 und 1, dann können wir dieses Integral mit dem Hit-or-miss Verfahren mit kleinerer Varianz berechnen. Für $f(x)$ in (3.28) könnten wir zum Beispiel

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

wählen. Dann ergeben sich die verbesserten Schätzwerte für das Integral und die Varianz in der obigen 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 und Grenzwertsatz: Das Programm `gaussdistr.c` auf Seite 58 erzeugt die Summe s von n unabhängigen und auf dem Einheitsintervall $[0, 1]$ gleichverteilten Zufallszahlen x_1, \dots, x_n . Die erzeugende Funktion für s ist

$$Z(t) = \langle e^{ts} \rangle = \int_{I^n} d^n x e^{t(x_1 + \dots + x_n)} = \left(\int_0^1 dx e^{tx} \right)^n = t^{-n} (e^t - 1)^n, \quad (3.30)$$

und für den Mittelwert von s finden wir

$$m = \langle s \rangle = \left. \frac{dZ}{dt} \right|_{t=0} = \int_{I^n} d^n x (x_1 + \dots + x_n) = \frac{n}{2}. \quad (3.31)$$

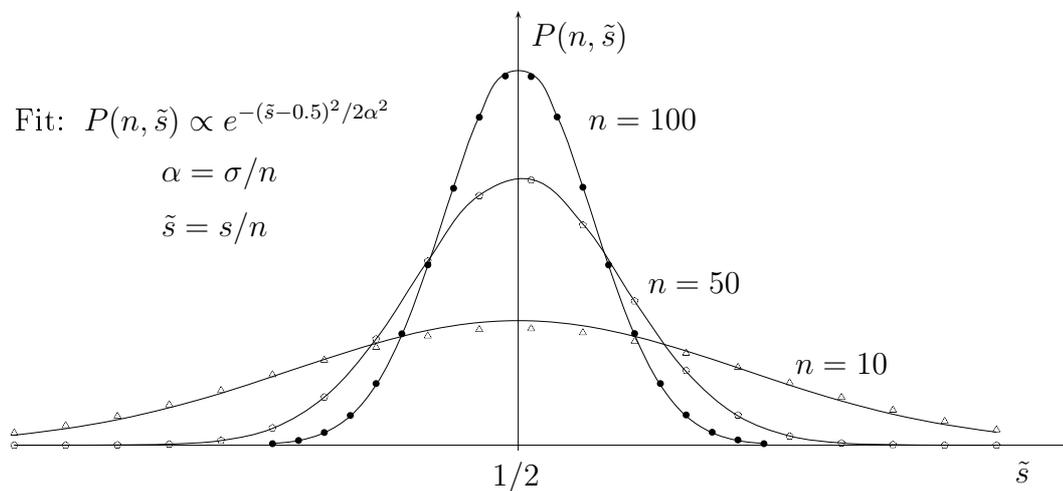
und für dessen Streuungsquadrat

$$\left. \frac{d^2 \log Z}{dt^2} \right|_{t=0} = \sigma^2 = \langle s^2 \rangle - m^2 = \frac{n}{12}. \quad (3.32)$$

Nach dem Gesetz der grossen Zahlen erwarten wir die GAUSSsche Verteilung

$$P_s = \frac{1}{\sqrt{2\pi} \sigma} e^{-(s-m)^2/2\sigma^2}. \quad (3.33)$$

Das Programm `gaussdistr.c` auf Seite 58 berechnet die Verteilung von s für die Summe von 10, 50 und 100 Zufallszahlen. Zur Bestimmung der Verteilung werden jeweils 1 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 GAUSSschen Verteilungen verglichen.



Im Anhang C beweisen wir das *Gesetz der grossen Zahlen*. Für gleichverteilte Zahlen in $[0, 1]$ ist der Mittelwert $1/2$ und die Varianz $1/12$. Die Ungleichung (B-12) für die Wahrscheinlichkeit dafür, dass s/n mehr als δ vom Mittelwert $1/2$ abweicht, ist

$$\Pr \left[\left| \frac{s}{n} - \frac{1}{2} \right| \leq \delta \right] \leq \frac{1}{12n\delta^2}. \quad (3.34)$$

3.2 Metropolis Algorithmus

Numerische Integrationsverfahren nähern Integrale durch endlichen Summen,

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

Für große n kann es vorteilhaft sein, die Stützpunkte \mathbf{q}_μ zufällig zu wählen. In vielen Anwendungen in der Physik 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

$$\int_0^1 f(\mathbf{q}) d^n q = \int_0^1 \frac{f(\mathbf{q})}{g(\mathbf{q})} g(\mathbf{q}) d^n q. \quad (3.35)$$

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

$$\int f(\mathbf{q}) d^n q \approx \frac{1}{M} \sum_{\mu=1}^M \frac{f(\mathbf{q}_\mu)}{g(\mathbf{q}_\mu)}, \quad (3.36)$$

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 der Gitterapproximation

$$\langle O \rangle \approx \frac{1}{Z} \int \mathcal{D}\mathbf{q} O(\mathbf{q}) e^{-S(\mathbf{q})}, \quad \mathcal{D}\mathbf{q} = d^n q, \quad Z = \int e^{-S(\mathbf{q})} \mathcal{D}\mathbf{q}, \quad (3.37)$$

wäre es wünschenswert, die Wahrscheinlichkeitsdichte in der BOLTZMANN-Verteilung,

$$P(\mathbf{q}) \mathcal{D}\mathbf{q} = \frac{1}{Z} e^{-S(\mathbf{q})} \mathcal{D}\mathbf{q}, \quad (3.38)$$

als Funktion g zu wählen, weil dann nur noch über $O(\mathbf{q})$ gemittelt werden muss,

$$\langle O \rangle \approx \bar{O} = \frac{1}{M} \sum_{\mu=1}^M O(\mathbf{q}_\mu). \quad (3.39)$$

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

$$I_k = \int_0^1 dq_1 \dots \int_0^1 dq_n O_k(\mathbf{q}) P(\mathbf{q}), \quad \int \mathcal{D}\mathbf{q} P(\mathbf{q}) = 1, \quad (3.40)$$

sollen für verschiedene Funktionen $O_k(\mathbf{q})$, aber dieselbe 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}' im Integrationsbereich 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

$$I = \frac{\text{Vol}}{M} \sum_{\mu=1}^M f(\mathbf{q}_\mu) \quad (3.41)$$

gilt. Jeder Punkt \mathbf{q}_μ der MARKOV-Kette nennt man eine *Konfiguration*. Das Programm `samplingflaeche.c` auf Seite 59 berechnet mit Hilfe des METROPOLIS-Algorithmus das eigentliche Integral

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

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 den berechneten Werte. Der letzte Eintrag ist das Resultat von $MA \cdot M = 10^3 \cdot 10^6 = 10^9$ MC-Iterationen und hat einen Fehler von -0.00555 .

M	5 000	1 0000	15 000	20 000	25 000	30 000	35 000
$I(M)$	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
$I(M)$	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
$I(M)$	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 Markovprozesse

Wir diskutieren nun eine Realisierung des „important sampling“. Dazu betrachten wir ein System mit einer endlichen Anzahl f Freiheitsgrade. Wir bezeichnen die Zustände mit $s \in 1, 2, \dots, f$. Die nach P -verteilten Konfigurationen werden nun mit Hilfe eines geeigneten MARKOV-Prozesses 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 davor geschah. Da $W(s, s')$ eine Übergangswahrscheinlichkeit ist, muss die stochastische Matrix W positiv und normiert sein,

$$W(s, s') \geq 0 \quad \text{und} \quad \sum_{s'} W(s, s') = 1. \quad (3.42)$$

Bei einem Zweistufenprozess von s nach s'' muss das System durch einen Zwischenzustand s_1 gehen. Deshalb ist die Wahrscheinlichkeit für den Übergang $s \rightarrow s'$ in zwei Schritten gleich

$$W^{(2)}(s, s') = \sum_{s_1} W(s, s_1)W(s_1, s'). \quad (3.43)$$

Ähnlich gilt für einen n -Stufen-Prozess

$$\begin{aligned} W^n(s, s') &= \sum_{s_1 \dots s_{n-1}} W(s, s_1)W(s_1, s_2) \cdots W(s_{n-1}, s') \\ &= \sum_{s_1} W^{n-1}(s, s_1)W(s_1, s'). \end{aligned} \quad (3.44)$$

Man versucht nun einen MARKOVprozess zu konstruieren, für den die Konfigurationen für grosse „Zeiten“ n gemäß (3.38) verteilt sind. Das Langzeitverhalten ($n \rightarrow \infty$) des System wird von W^n bestimmt.

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

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

Das Element p_s des stochastischen Vektors ist die Wahrscheinlichkeit dafür, das System

im Zustand s zu finden. Betrachte zum Beispiel die stochastische Matrix

$$W = \begin{pmatrix} a & 1-a \\ 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad (3.45)$$

welche die Eigenwerte 1 und a hat. Deren Potenzen konvergieren für $a < 1$ exponentiell schnell,

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

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

$$W = \begin{pmatrix} a & \frac{1}{2}(1-a) & \frac{1}{2}(1-a) \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad a \leq 1, \quad (3.46)$$

mit den Potenzen

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

und

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

Für $a < 1$ wird ein stochastischer Vektor p in

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

abgebildet. Die Folge pW^n nähert sich schnell einer periodischen Bahn. 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

$$\mathbf{p}_n = \frac{1}{n} \sum_{j=0}^{n-1} \mathbf{p} W^j. \quad (3.47)$$

Die Menge der stochastischen Vektoren ist kompakt und deshalb hat diese Folge eine konvergente Teilfolge,

$$\frac{1}{n_k} \sum_{j=0}^{n_k-1} \mathbf{p} W^j \longrightarrow \mathbf{P}.$$

Wir multiplizieren von rechts mit W und finden

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

Lassen wir nun in der Differenz dieser zwei Formeln, also in

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

n_k gegen ∞ streben, so folgt

$$\mathbf{P}W = \mathbf{P}. \quad (3.48)$$

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*. Das W im ersten Beispiel ist attraktiv, dasjenige im zweiten Beispiel nicht. Wir notieren, dass für zwei reelle Zahlen p und p' gilt

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

so dass für zwei stochastische Vektoren

$$\|\mathbf{p} - \mathbf{p}'\| = 2 - 2 \sum_s \min(p_s, p'_s). \quad (3.49)$$

Nun beweisen wir, dass ein attraktives W auf Vektoren Δ mit

$$\|\Delta\| \equiv \sum |\Delta_s| = 2 \quad \text{und} \quad \sum \Delta_s = 0 \quad (3.50)$$

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 (3.49) 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 $s \neq s'$

$$\begin{aligned} \|e_s W - e_{s'} W\| &= 2 - 2 \sum_{s''} \min \{W(s, s''), W(s', s'')\} \\ &\leq 2 - 2\delta = (1 - \delta) \underbrace{\|e_s - e_{s'}\|}_{=2} \quad \text{mit} \quad 0 < \delta < 1, \end{aligned} \quad (3.51)$$

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 beliebige Vektoren Δ in (3.50). 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

$$\sum_{\Delta_s \geq 0} \Delta_s = 1 \quad \text{und} \quad \sum_{\Delta_s < 0} \Delta_s = -1. \quad (3.52)$$

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 (3.52) gilt

$$\|\Delta\| = 2 = -2 \sum \Delta_s \sum \Delta_{s'} = - \sum \Delta_s \Delta_{s'} \underbrace{\|e_s - e_{s'}\|}_{=2}, \quad (3.53)$$

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

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

wobei wir von (3.52) Gebrauch machten, und dies führt auf die Ungleichung

$$\begin{aligned} \|\Delta W\| &= \left\| \sum \Delta_s e_s W + \sum \Delta_{s'} e_{s'} W \right\| = \left\| - \sum \Delta_{s'} \Delta_s (e_s - e_{s'}) W \right\| \\ &\leq - \sum \Delta_s \Delta_{s'} \|(e_s - e_{s'}) W\| = - \sum \Delta_s \Delta_{s'} \|e_s - e_{s'}\| (1 - \delta), \end{aligned} \quad (3.54)$$

wobei wir die Abschätzung (3.51) benutzten. Der Vergleich mit (3.53) führt dann auf die gesuchte Ungleichung,

$$\|\Delta W\| \leq (1 - \delta) \|\Delta\| \quad (3.55)$$

die besagt, dass W auf den Vektoren (3.50) 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

$$\|\Delta W^n\| \leq (1 - \delta)^n \|\Delta\|. \quad (3.56)$$

Nun wenden wir diese Abschätzung auf $\mathbf{p} - \mathbf{P}$ an, wobei \mathbf{P} den Fixpunkt in (3.48) bezeichnet und \mathbf{p} ein beliebiger stochastischer Vektor ist. Da die Elemente von $\mathbf{p} - \mathbf{P}$ zu Null addieren, gilt offensichtlich (3.55) und wir folgern

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

oder, dass

$$\mathbf{p}W^n \xrightarrow{n \rightarrow \infty} \mathbf{P}. \quad (3.57)$$

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,

$$W^{\text{eq}}(s, s') = \lim_{n \rightarrow \infty} W^n(s, s') = P_{s'}, \quad (3.58)$$

wobei $P_{s'}$ das Element s' von \mathbf{P} bezeichnet. Nun folgt, dass die Gleichgewichtsgrößen \mathbf{P} und W^{eq} *eindeutig* sind: Es sei \mathbf{P}' ein zweiter Fixpunkt des MARKOV-Prozesses. 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 \mathbf{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 $\mathbf{q} \in \mathbb{R}^n$ gegeben sind, verallgemeinert: Anstelle der Elemente p_s von stochastischen Vektoren führt man *Wahrscheinlichkeitsdichten* $p(\mathbf{q})$ ein. Summen über den diskreten Index s werden zu Integralen über die kontinuierliche Variable \mathbf{q} . Für derartige System haben die Bedingungen (3.42) die Form

$$W(\mathbf{q}, \mathbf{q}') \geq 0 \quad \text{und} \quad \int \mathcal{D}\mathbf{q}' W(\mathbf{q}, \mathbf{q}') = 1. \quad (3.59)$$

Bezeichnet $P(\mathbf{q})$ die Gleichgewichtsverteilung, so lautet die Bedingung (3.48)

$$P(\mathbf{q}') = \int \mathcal{D}\mathbf{q} P(\mathbf{q}) W(\mathbf{q}, \mathbf{q}'). \quad (3.60)$$

3.4 Detailliertes Gleichgewicht

In der EUKLIDischen Quantenmechanik oder der Quantenstatistik ist $P(\mathbf{q})$ die Boltzmannverteilung (3.38). Eine einfache Gleichung, welche die Bedingung (3.48) beziehungsweise (3.60) 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

$$P_s W(s, s') = P_{s'} W(s', s). \quad (3.61)$$

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

$$\sum_s P_s W(s, s') = \sum_{s'} P_{s'} W(s', s) = P_{s'}. \quad (3.62)$$

Die Bedingung des detaillierten Gleichgewichts (3.61) 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 findet sich im empfehlenswerten Buch von NEWMAN und BARKENNA [26].

3.4.1 Akzeptanzrate

Die Übergangswahrscheinlichkeit $W(s, s')$ wird durch (3.61) nicht eingeschränkt und wir können eine Änderung der $W(s, s')$ durch Anpassung von $W(s, s)$ die Summenregel in (3.59) beibehalten. Wir schreiben nun die Übergangswahrscheinlichkeit als Produkt einer Selektionswahrscheinlichkeit und einer Akzeptanzrate,

$$W(s, s') = T(s, s')A(s, s'). \quad (3.63)$$

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,

$$\frac{T(s, s')A(s, s')}{T(s', s)A(s', s)} = \frac{P_{s'}}{P_s}, \quad (3.64)$$

legt das Verhältnis der Akzeptanzraten nicht fest. Ein grosses Problem für Monte-Carlo Algorithmen ist eine optimale 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 (3.64) erfüllt wird.

3.4.2 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

$$T(s, s') = \begin{cases} 1/N & s \rightarrow s' \text{ möglich} \\ 0 & \text{sonst.} \end{cases} \quad (3.65)$$

Die Übergangswahrscheinlichkeit ist

$$W(s, s') = T(s, s') \cdot \min \left(\frac{P_{s'} \cdot T(s', s)}{P_s \cdot T(s, s')}, 1 \right), \quad (3.66)$$

wobei nach Vereinbarung $W(s, s')$ verschwinden soll, wenn $T(s, s')$ Null ist. Diese Wahrscheinlichkeit erfüllt offensichtlich die Bedingung für das detaillierte Gleichgewicht,

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

Es existiert eine Verallgemeinerung dieser Methode von HASTING [28]. Die Verbesserung, verglichen mit dem einfachen METROPOLIS-Algorithmus, kann je nach Modell oder Wahl von $T(s, s')$ beträchtlich sein.

Beim universell einsetzbaren METROPOLIS-Algorithmus beginnt man mit einer Anfangskonfiguration 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 geben eine Implementierung des Algorithmus für die Simulation eines Gittersystems, zum Beispiel eines diskretisierten quantenmechanischen Systems auf n Gitterpunkten. Man wählt eine anfängliche Konfigurationen $\mathbf{q} = (q_1, \dots, q_n)$. Nun verändert oder belässt man 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. Wird die Wirkung beim Übergang $q_1 \rightarrow q'_1$ erniedrigt, $\Delta S < 0$, so wird q_1 durch q'_1 ersetzt.
3. Nimmt die Wirkung aber zu, so 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 t , so ist ein „sweep“ übers Gitter oder eine *Monte-Carlo-Iteration* beendet und man fängt wieder mit dem ersten Gitterplatz an.
6. 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. Dabei definiert eine MC-Iteration die Zeiteinheit. Nachdem die Erwartungswerte nur noch statistisch schwanken, beginnt man die Observablen gemäß (3.39) zu messen.

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

$$H |1\rangle = E_1 |1\rangle \quad \text{und} \quad H |2\rangle = E_2 |2\rangle, \quad \Delta E = E_2 - E_1 > 0. \quad (3.67)$$

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

$$W = \begin{pmatrix} 1 - b_{21} & b_{21} \\ 1 & 0 \end{pmatrix}. \quad (3.68)$$

Die Potenzen dieser Matrix,

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

konvergieren exponentiell schnell gegen die stochastische Matrix

$$W^\infty = \frac{1}{1 + b_{21}} \begin{pmatrix} 1 & b_{21} \\ 1 & b_{21} \end{pmatrix} = \frac{1}{Z} \begin{pmatrix} e^{-\beta E_1} & e^{-\beta E_2} \\ e^{-\beta E_1} & e^{-\beta E_2} \end{pmatrix} \quad (3.69)$$

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 BOLTZMANN-Verteilung

$$\mathbf{p} \longrightarrow \mathbf{P} = \frac{1}{Z} (e^{-\beta E_1}, e^{-\beta E_2}). \quad (3.70)$$

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

$$W = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 2 - b_{21} - b_{31} & b_{21} & b_{31} \\ 1 & 1 - b_{32} & b_{32} \\ 1 & 1 & 0 \end{pmatrix}. \quad (3.71)$$

Die Potenzen von W konvergieren gegen

$$W^\infty = \frac{1}{Z} \begin{pmatrix} e^{-\beta E_1} & e^{-\beta E_2} & e^{-\beta E_3} \\ e^{-\beta E_1} & e^{-\beta E_2} & e^{-\beta E_3} \\ e^{-\beta E_1} & e^{-\beta E_2} & e^{-\beta E_3} \end{pmatrix} \quad (3.72)$$

und jede Wahrscheinlichkeitsverteilung gegen

$$\mathbf{P} = \frac{1}{Z} (e^{-\beta E_1}, e^{-\beta E_2}, e^{-\beta E_3}). \quad (3.73)$$

3.4.3 Wärmebad-Methode

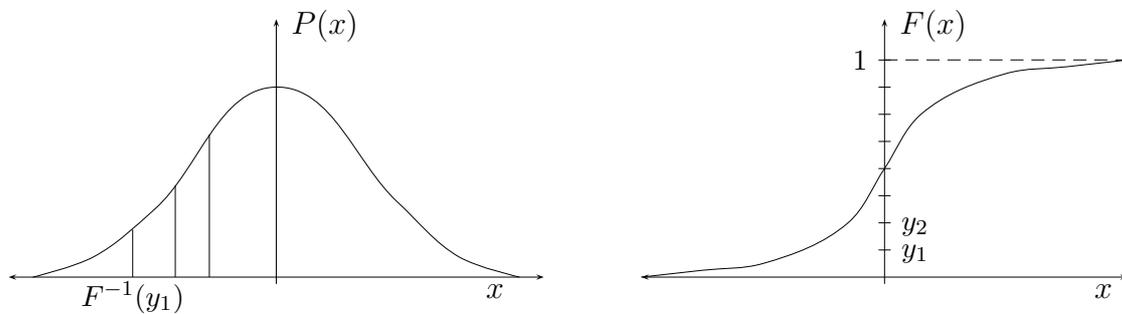
Bei dieser Methode hängt die Übergangswahrscheinlichkeit $W(s, s')$ nur vom Endzustand s' ab. Wegen der Bilanzgleichung (3.61) ist das Verhältnis $W(s)/P_s$ unabhängig von s und mit den Normierungsbedingungen an P und W folgt

$$W(s, s') = P_{s'}. \quad (3.74)$$

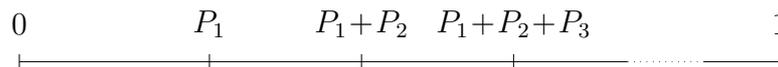
Diese Form eignet sich allerdings nur für Systeme mit relativ wenig diskreten Zuständen, falls die Wahrscheinlichkeitsverteilung leicht integriert beziehungsweise summiert werden kann. Wir illustrieren dies anhand eines eindimensionalen Integrals. Wir möchten nach $P(x)$ verteilte Zahlen generieren. Dazu betrachten wir die monoton wachsende Stammfunktion

$$F(x) = \int_{-\infty}^x P(y) dy$$

und generieren Zufallszahlen y_i im Wertebereich $[0, 1]$ von F . Sind diese gleichverteilt, dann sind offensichtlich ihre Urbilder $x_i = F^{-1}(y_i)$ nach $P(x)$ verteilt, wie in folgender Abbildung skizziert.



Für ein System mit einer endlichen Anzahl Zustände ist die Stammfunktion $F(x)$ eine Treppenfunktion und 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,

$$W = \begin{pmatrix} P_1 & P_2 & \dots & P_n \\ P_1 & P_2 & \dots & P_n \\ \vdots & \vdots & \dots & \vdots \\ P_1 & P_2 & \dots & P_n \end{pmatrix} \implies W^2 = W. \quad (3.75)$$

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 $P(\mathbf{q})$. 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 \mathbf{q} zur (MC)Zeit $t = 1$, wäre zum Beispiel zur Zeit $t = 2$

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

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.

3.5 Anharmonischer Oszillator

Wir untersuchen eindimensionale Systeme mit diskretisierter EUKLIDischer Wirkung

$$S = \epsilon \sum_{j=0}^{n-1} \left\{ \frac{m}{2} \frac{(q_{j+1} - q_j)^2}{\epsilon^2} + V(q_j) \right\}. \quad (3.76)$$

Insbesondere betrachten wir hier den anharmonischen Oszillator

$$V(q) = \mu q^2 + \lambda q^4. \quad (3.77)$$

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 klein genug sein um dem Kontinuums-Limes genügend 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

$$\frac{\epsilon}{\lambda_0} \leq \frac{1}{10} \quad \text{und} \quad \frac{n\epsilon}{\lambda_0} \geq 10 \quad (3.78)$$

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

$$\Delta_O = \sqrt{\frac{\langle O^2 \rangle}{\langle O \rangle^2} - 1} \sim (\text{Anz. Gitterpunkte})^{-1/2}. \quad (3.79)$$

Zur Schätzung der Erwartungswerte mitteln wir nach (3.39) über identische Gitter,

$$\bar{O} = \frac{1}{M} \sum_{\mu=1}^M O(\mathbf{q}_\mu). \quad (3.80)$$

Es braucht einige Zeit, gemessen in METROPOLIS-Iterationen, bis das Gleichgewicht erreicht ist, d.h. bis der MARKOV-Prozess konvergiert. Für den anharmonischen Oszillator und die gewählten Gitterabstände ϵ ist das Gleichgewicht, je nach Anfangsbedingung, nach etwa 10 – 100 Iterationen erreicht. Danach erzeugen wir weitere Gitterkonfigurationen und werten diese aus. Damit diese Konfigurationen wenig korreliert sind, wird nur jeder MA 'te Sweep durch das Gitter ausgewertet, so dass $M \cdot MA$ Konfigurationen erzeugt werden müssen, wenn man M Konfigurationen auswerten will. 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 sehr 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 dem empfehlenswerten Artikel von Creutz und Freedman [30])

$$\frac{1}{2m} \langle 0 | \hat{p}^2 | 0 \rangle = \frac{1}{2} \langle 0 | \hat{q} V'(\hat{q}) | 0 \rangle, \quad (3.81)$$

so dass gilt

$$2E_0 = \langle 0 | \hat{q} V'(\hat{q}) + 2V(\hat{q}) | 0 \rangle = \frac{1}{Z} \int \mathcal{D}q e^{-S[q]} (qV'(q) + 2V(q)). \quad (3.82)$$

Für die Energie des ersten angeregten Zustands finden wir mit (2.66) (für $\beta \rightarrow \infty$) den Ausdruck

$$E_1 = -\frac{1}{\Delta\tau} \lim_{\tau \rightarrow \infty} \log \frac{\langle 0 | q_E(\tau + \Delta\tau) q(0) | 0 \rangle}{\langle 0 | q_E(\tau) q_E(0) | 0 \rangle} + E_0. \quad (3.83)$$

Um die Wellenfunktion des Grundzustandes zu berechnen, benutzen wir

$$K(\tau, q', q) = \sum_n e^{-\tau E_n} \psi_n(q') \psi_n(q), \quad (3.84)$$

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

$$\lim_{\tau \rightarrow \infty} \frac{K(\tau, q, q)}{\int dq K(\tau, q, q)} = |\psi_0(q)|^2 \quad (3.85)$$

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 (3.76, 3.77) und die Koordinaten mit Potenzen von ϵ und führen die dimensionslosen Gittergrößen (m_L, μ_L, λ_L) ein

$$q_L = q/\epsilon, \quad m_L = \epsilon m, \quad \mu_L = \epsilon^3 \mu \quad \text{und} \quad \lambda_L = \epsilon^5 \lambda, \quad (3.86)$$

dann ist die Differenz der Wirkungen von zwei Konfigurationen \mathbf{q}' und \mathbf{q} , welche sich nur in der j 'ten Variablen unterscheiden, gleich

$$S(\mathbf{q}') - S(\mathbf{q}) \approx (q'_j - q_j)_L \left\{ -m_L (q_{j+1} + q_{j-1})_L \right.$$

$$+(q'_j + q_j)_L \{m_L + \mu_L + \lambda_L(q_j'^2 + q_j^2)_L\}. \quad (3.87)$$

Der Nachteil dieser Methode ist, dass wir physikalische Grössen in Einheiten der unphysikalischen 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:

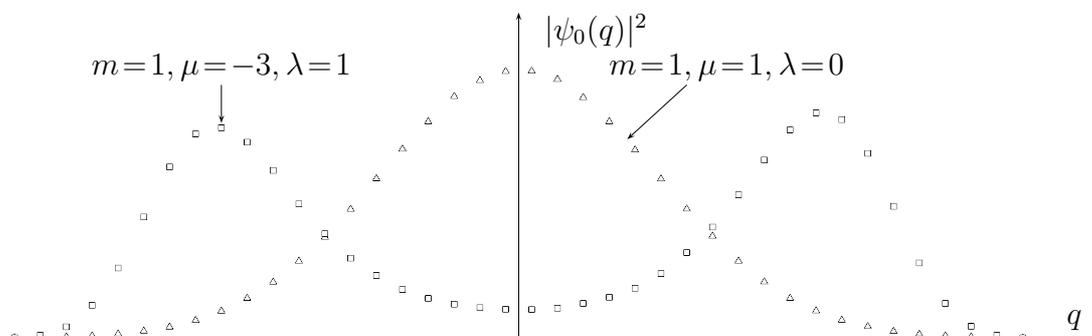
$$\epsilon = a\ell, \quad q = \tilde{q}\ell, \quad m = \tilde{m}/\ell, \quad \mu = \tilde{\mu}/\ell^3 \quad \text{und} \quad \lambda = \tilde{\lambda}/\ell^5. \quad (3.88)$$

Dann ist

$$S(\mathbf{q}') - S(\mathbf{q}) = (\tilde{q}'_j - \tilde{q}_j) \left\{ -\frac{\tilde{m}}{a}(\tilde{q}_{j+1} + \tilde{q}_{j-1}) + (\tilde{q}'_j + \tilde{q}_j) \left(\frac{\tilde{m}}{a} + a\tilde{\mu} + a\tilde{\lambda}(\tilde{q}_j'^2 + \tilde{q}_j^2) \right) \right\}. \quad (3.89)$$

Diese Formel wurde im Programm `anharmonic1.c` auf Seite 60 bei der Definition der Funktion `deltaS` in der Header-datei `stdanho.h` auf Seite 63 benutzt. Die Modellparameter m, μ und λ , die Anzahl Gitterpunkte N und die Gitterkonstante a sind in `constants.h` auf Seite 63 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.

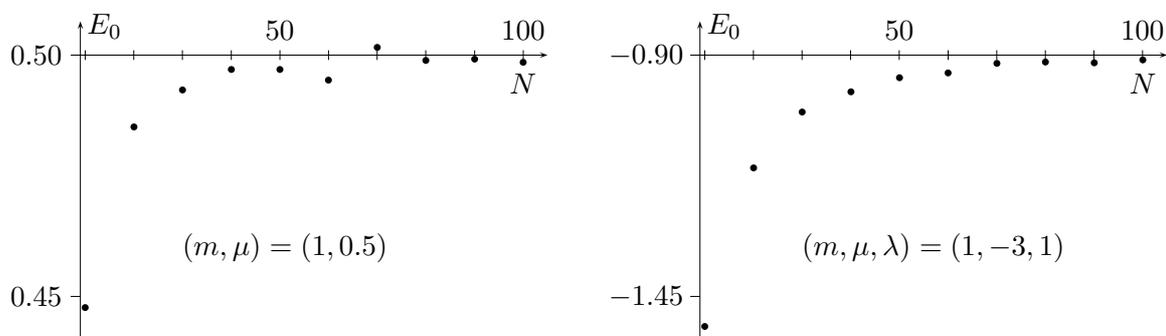


Das sehr ähnliche Programm `anharmonic2.c` auf der Seite 61 berechnet die Grundzustandsenergie E_0 mit Hilfe des Virialsatzes (3.82). Dabei wurden bei festgehaltener physikalischer Länge Na (in Einheiten von ℓ) die Anzahl Gitterpunkte oder äquivalent dazu die Gitterkonstante verändert. Bereits für $a \sim 0.2$ ist man dem Kontinuumslimites $a \rightarrow 0$ 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

(3.90)

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 $E_0(\text{harm. Osz}) \approx 0.50$ 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 ist

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

In der obigen Tabelle haben wir den Schätzwert (Wick) für diese Größe gelistet. Die Abweichung von Null ist ein Maß für die Güte der MC-Simulation.

3.6 Programme zu Kapitel 3

Hier finden sie die im Kapitel über „Monte-Carlo Simulationen“ benutzten Programme `1dintegral.c`, `hitmissflaeche.c`, `gaussdistr.c`, `samplingflaeche.c`, `anharmomic1.c`, `anharmomic2.c` und `constants.h`, `stdanho.h`.

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 SIMPSON-Verfahren 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("%i_ _%.6f_ _%.6f_ _%.6f_ _%.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 10000001 /* 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 MC-Iterationen */
int main(void)

```

```

{ double sum , mean [ 1000 ] ;
  double dM = 100.0 / (double) M ; /* Skalierungsfaktor 100 */
  int i , j , sumi ;
  /* Initialisierung */
  for ( i = 0 ; i < 100 ; i ++ )
    mean [ i ] = 0 ; sum = 0 ; srand48 ( 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

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

```

/* Pogramm 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=%0.5f, Fehler=%0.5f\n", i, I, 2.4313142-I);
    };
  return 0;
}

```

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.

```

/* 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,stretch,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 (3.82) 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;
}

```

3.6.1 Headerdateien

Die folgenden Headerdateien werden in `anharmoini1.c` und `anharmoini2.c` eingebunden.

constants.h: Hier werden die Konstanten N , A , MG , MA , BIN , $INTERV$, $MASSE$, MU , $LAMBDA$, $DELTA$ und die Variablen $q[N]$, $qneu$, $massel$, $lambdal$, $mueleff$, 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)*(mueff+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;
}

```

3.7 Anhang B: Wahrscheinlichkeiten

Es sei $X : \Omega \rightarrow \mathbb{R}$ eine *Zufallsvariable* mit Erwartungswert (Mittelwert)

$$\langle X \rangle = \sum_{w \in \Omega} X(w) \cdot \Pr[w] = \sum_{x \in X(\Omega)} x \cdot \sum_{\substack{w \in \Omega \\ X(w)=x}} \Pr[w] = \sum_{x \in X(\Omega)} x \cdot P(X = x), \quad (\text{B-1})$$

wobei $\Pr[w]$ die Wahrscheinlichkeit für das Ereignis w ist und $P(X = x)$ die Verteilung von X . Für beliebige Zufallsvariablen X_1, \dots, X_N ist der Erwartungswert linear,

$$\langle X \rangle = \langle X_1 \rangle + \dots + \langle X_N \rangle. \quad (\text{B-2})$$

Die Zufallsvariablen heißen *unabhängig*, wenn für alle $x_i \in X_i(\Omega)$ mit $i = 1, \dots, N$ gilt

$$P[X_1 = x_1, \dots, X_N = x_N] = P[X_1 = x_1] \cdots P[X_N = x_N]. \quad (\text{B-3})$$

Nach dieser Definition kann X nur unabhängig von X sein, wenn $P[X = x] \in \{0, 1\}$ für alle $x \in X(\Omega)$ gilt. Die erzeugende Funktion von unabhängigen Variablen faktorisiert,

$$\begin{aligned} \langle e^{i(t_1 X_1 + \dots + t_N X_N)} \rangle &= \sum_{x_1, \dots, x_N} e^{i(t_1 x_1 + \dots + t_N x_N)} P[X_1 = x_1, \dots, X_N = x_N] \\ &= \sum_{x_1, \dots, x_N} e^{it_1 x_1} P[X_1 = x_1] \cdots e^{it_N x_N} P[X_N = x_N]. \quad (\text{B-4}) \\ &= \langle e^{it_1 X_1} \rangle \cdots \langle e^{it_N X_N} \rangle. \end{aligned}$$

Daraus folgt für $t = t_1 = \dots = t_N$ die nützliche Gleichung für die erzeugenden Funktionen der verbundenen Korrelationen von unabhängigen Zufallsvariablen,

$$\log \langle e^{itX} \rangle = \sum_{i=1}^N \log \langle e^{itX_i} \rangle, \quad X = X_1 + \dots + X_N. \quad (\text{B-5})$$

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

$$\text{Var}[X] = \sum_{i=1}^N \text{Var}[X_i], \quad \text{Var}[X] \equiv \langle (\Delta X)^2 \rangle = \langle X^2 \rangle - \langle X \rangle^2, \quad (\text{B-6})$$

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 $t \in \mathbb{R}^+$

$$P[X \geq t] \leq \frac{\langle X \rangle}{t}. \quad (\text{B-7})$$

Der Beweis ist relativ einfach:

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

Die folgende Ungleichung gilt für reellwertige Zufallsvariablen,

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

$$P[|\Delta X| \geq t] \leq \frac{\text{Var}[X]}{t^2}. \quad (\text{B-8})$$

Der Beweis ist ein Einzeiler,

$$P[|\Delta X| \geq t] = P[(\Delta X)^2 \geq t^2] \stackrel{(\text{B-7})}{\leq} \frac{\text{Var}[X]}{t^2}.$$

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

$$K := \frac{\text{Var}[X]}{\epsilon \cdot \delta^2} = \text{const}, \quad (\text{B-9})$$

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

$$P[|\Delta Z| \geq \delta] \leq \epsilon. \quad (\text{B-10})$$

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,

$$\frac{\sqrt{\text{Var}[Z]}}{\langle Z \rangle} \leq \frac{1}{N} \frac{\sqrt{\text{Var}[X]}}{\langle X \rangle}. \quad (\text{B-11})$$

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

$$P[|\Delta Z| \geq \delta] \leq \frac{\text{Var}[Z]}{\delta^2} = \frac{\text{Var}[X]}{N \cdot \delta^2} \leq \epsilon. \quad (\text{B-12})$$

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

$$Y_N = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{i=1}^N X_i. \quad (\text{B-13})$$

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 GAUSS-verteilt sind mit Mittel 0 und Varianz σ^2 .

3.8 Aufgaben

Aufgabe 1: Markov Prozess

Betrachte ein System mit 3 Energie-Eigenzuständen mit Energien $E_1 < E_2 < E_3$. Die erlaubten Übergänge sind von $\mu \rightarrow (\mu+1) \bmod 1$. 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 4

Spinketten

Als typisches Beispiel für eine Gittertheorie werden wir oft das ISING-Modell und seine Verallgemeinerungen bemühen. Es dient als einfaches Modell für einen Ferromagneten. Man stellt sich vor, dass auf jedem Punkt eines Kristallgitters ein „Elementarmagnet“ sitzt, der sich entlang einer festen Achse ausrichten kann. Von einem derart groben klassischen Modell kann man (zunächst) keine quantitativen 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 1043, 1403 und 631 °K. In diesem Kapitel werden wir nach einer Diskussion von d -dimensionale Spinmodellen die einfachen Spinketten untersuchen. Diese zeigen für kurzreichweitige Wechselwirkungen keinen Phasenübergang bei endlichen Temperaturen.

4.1 Isingartige Spinmodelle

Das ISING-Modell ist der harmonische Oszillator der statistischen Physik. Es wurde 1920 von E. ISINGs Doktorvater WILHELM LENZ bei der Untersuchung des Ferromagnetismus eingeführt [32]. Das eindimensionale Modell wurde von ISING gelöst [33]. Es zeigt sich, dass in einer Dimension das Phänomen der spontanen Magnetisierung noch nicht auftritt.

Für das *zweidimensionale* ISING-Modell gelang es PEIERLS 1936 erstmalig einen Beweis für die Existenz einer Tieftemperaturphase mit spontaner Magnetisierung zu führen [40]. Es tritt ein Phasenübergang bei endlicher Temperatur auf und 1941 konnten KRAMERS und WANNIER die Phasenübergangstemperatur T_c ohne Magnetfeld exakt berechnen [41]. Drei Jahre später konstruierte LARS ONSAGER dann mit algebraischen Methoden

die exakte Lösung [42]. 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.

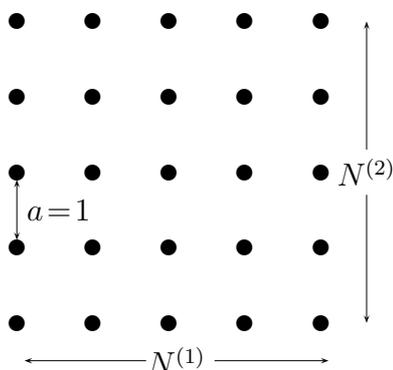
Dieser Kommentar soll verdeutlichen, welche Bedeutung ONSAGERS Lösung in der Geschichte der Theoretischen Physik zukommt. Schließlich sind ISING-artige Modelle die einzigen nicht-trivialen statistischen Modelle, die analytisch gelöst werden können und einen Phasenübergang aufweisen. Heute sind mehrere 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. Man ist auf Approximationen, zum Beispiel die Hoch- und Tieftemperaturentwicklungen oder Monte Carlo Simulationen angewiesen. In vier und mehr Dimensionen werden wichtige Eigenschaften des Modells exakt durch die „Mean-field“ Theorie beschrieben.

Nun zur Definition des Modells: Die Gitterpunkte $x = (x^1, \dots, x^d)$ sind Elemente eines d -dimensionalen Gitters Λ . Der Einfachheit halber betrachten wir meistens ein *einfach kubisches Gitter*

$$x^\mu \in \{1, 2, 3, \dots, N^{(\mu)}\} \quad \text{mit} \quad N^{(\mu)} \in \mathbb{N}. \quad (4.1)$$

Die Gitterkonstante a haben wir gleich 1 gesetzt.



Oft verwenden wir periodische Randbedingungen, für welche $(x^1, \dots, N^{(\mu)}, \dots, x^d)$ und $(x^1, \dots, 1, \dots, x^d)$ nächste Nachbarn sind. Dann wird das Gitter zu einem (diskretisierten)

Torus. In der Thermodynamik wählt man zunächst eine endliche Anzahl Gitterpunkte $V = N^{(1)} \dots N^{(d)}$, obwohl am Ende der thermodynamische Grenzfall $V \rightarrow \infty$ steht. Für $a = 1$ hat die Einheitszelle das Volumen Eins und V ist gleichzeitig das Gittervolumen.

Auf jedem Gitterpunkt wird ein zweiwertiger 'Spin' definiert $s_x \in \{-1, 1\} = \mathbb{Z}_2$. Man sollte das Wort 'Spin' hier allerdings nicht allzu wörtlich nehmen. Wegen den periodischen Randbedingungen gilt

$$s_{x+a_\mu} = s_x, \quad \mu = 1, \dots, d. \quad (4.2)$$

Hier ist a_μ der Vektor der Länge $N^{(\mu)}$ in die Richtung μ . Jeder Punkt im Innern des 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 ,

$$w : \Lambda \longrightarrow \underbrace{\mathbb{Z}_2 \times \mathbb{Z}_2 \times \dots \times \mathbb{Z}_2}_{V=|\Lambda|} = (\mathbb{Z}_2)^V. \quad (4.3)$$

Da jeder der V Spins 2 Werte annehmen kann gibt es 2^V verschiedene Konfigurationen.

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. Im ISING-Modell ist die Energiefunktion durch

$$H_\Lambda(w) = -J \sum_{\langle xy \rangle} s_x s_y - h \sum_x s_x \quad (4.4)$$

gegeben. Dabei bezeichnet $\langle xy \rangle$ ein Paar von nächsten Nachbarn auf dem Gitter. J ist die Kopplungsstärke zwischen benachbarten Spins und h ein äußeres Magnetfeld. Oft werden wir den Spezialfall $h = 0$ betrachten. Im kanonischen Ensemble tritt eine Konfiguration w mit dem BOLTZMANNfaktor

$$\exp(-\beta H_\Lambda(w)), \quad \beta = \frac{1}{k_b T} \quad (4.5)$$

als Gewicht auf. T ist die absolute Temperatur und k_b die BOLTZMANNkonstante. Die Zustandssumme ist durch

$$Z_\Lambda(\beta, J, h) = \sum_w \exp(-\beta H_\Lambda(w)) = \sum_{s_x \in \pm 1} \exp(-\beta H_\Lambda(\{s_x\})) \quad (4.6)$$

gegeben. Die Summe geht über alle 2^V Konfigurationen der V Spins. Die Zustandssumme hängt von der inversen Temperatur β , der Kopplungsstärke J , dem äußeren Magnetfeld h und dem Gitter Λ ab.

Der Erwartungswert einer beliebigen Observable $A(w)$ ist

$$\langle A \rangle_\Lambda(\beta, J, h) = \frac{1}{Z_\Lambda(\beta, J, h)} \sum_w A(w) e^{-\beta H_\Lambda(w)}. \quad (4.7)$$

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 . Die wichtigsten Größen der Thermodynamik lassen sich bereits aus der Zustandssumme ableiten.

Zum Beispiel ist die HELMHOLTZsche freie Energie proportional zum Logarithmus der Zustandssumme,

$$F_\Lambda(\beta) = -\frac{1}{\beta} \log Z_\Lambda(\beta). \quad (4.8)$$

Im thermodynamischen Grenzfall $V \rightarrow \infty$ divergiert diese extensive Größe und man benutzt statt ihrer die freie Energiedichte

$$f_\Lambda(\beta) = \frac{1}{V} F_\Lambda(\beta). \quad (4.9)$$

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,

$$f_\Lambda(\beta) \xrightarrow{V \rightarrow \infty} f(\beta). \quad (4.10)$$

Die Energie einer einzelnen Konfigurationen ist dem Experimentator nicht zugänglich. Gemessen wird der Erwartungswert der Energie im Gleichgewichtszustand, die sogenannte innere Energie

$$\begin{aligned} U_\Lambda(\beta) &= \langle H \rangle_\Lambda(\beta) = \frac{1}{Z_\Lambda(\beta)} \sum_w H_\Lambda e^{-\beta H_\Lambda(w)} \\ &= -\frac{1}{Z_\Lambda(\beta)} \frac{\partial}{\partial \beta} \sum_w e^{-\beta H_\Lambda(w)} = -\frac{\partial}{\partial \beta} \log Z_\Lambda(\beta). \end{aligned} \quad (4.11)$$

Ersetzen wir den Logarithmus der Zustandssumme durch die freie Energie, so finden wir

auch

$$U_\Lambda(\beta, h) = \frac{\partial}{\partial \beta} (\beta F_\Lambda(\beta, h)) = F_\Lambda(\beta, h) - T \frac{\partial}{\partial T} F_\Lambda(\beta, h).$$

Die Magnetisierung *einzelner* Spinkonfigurationen ist uninteressant, im Gegensatz zur mittleren makroskopischen Magnetisierung. Sie entspricht der 1-Punktfunktion

$$m := \frac{1}{V} \left\langle \sum_{\Lambda} s_x \right\rangle = \langle s_x \rangle = -\frac{1}{V} \frac{\partial}{\partial h} F_\Lambda(\beta, h) = -\frac{\partial}{\partial h} f_\Lambda(\beta, h) \quad (4.12)$$

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

$$G^{(n)}(x_1, \dots, x_n) = \langle s_{x_1} \cdots s_{x_n} \rangle, \quad x_1 \in \Lambda, \dots, x_n \in \Lambda. \quad (4.13)$$

Speziell die 2-Punktfunktion schreiben wir als

$$G(x, y) = \langle s_x s_y \rangle. \quad (4.14)$$

Sie beschreibt die Korrelation zwischen zwei möglicherweise weit 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.

4.2 Ising-Kette

In seiner Dissertation studierte ERNST ISING die lineare Kette von magnetischen Momenten oder 'Spins' [33]. Die Spins können wie in der folgenden Abbildung auch durch Vektoren 'auf' und 'ab' 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 $N = |\Lambda|$ Gitterpunkten und 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,

$$w : \Lambda \longrightarrow \mathbb{Z}_2^N, \quad \Lambda \ni x \longrightarrow s_x \in \mathbb{Z}_2. \quad (4.15)$$

Wir identifizieren die Spins auf den beiden Gitterpunkten 1 und $N + 1$, so dass 1 und N nächste Nachbarn sind. Für die ISING-Kette vereinfacht sich die Energiefunktion (4.4) zu

$$H_\Lambda(w) = -J \sum_{x=1}^N s_x s_{x+1} - h \sum_{x=1}^N s_x. \quad (4.16)$$

Für $J > 0$ werden die dann ferromagnetische Wechselwirkungen zwischen nächsten Nachbarn minimal wenn alle Spins in dieselbe Richtung zeigen.

4.2.1 Transfermatrix

In 1 Dimension (auch in $d = 2$ für $h = 0$) kann das ISING-Modell exakt behandelt werden. Dazu formen wir die Zustandssumme der ISING-Kette um,

$$\begin{aligned} Z_\Lambda(\beta) &= \sum_w e^{-\beta H_\Lambda(w)} = \sum_{s_1, \dots, s_N} e^{\beta J s_1 s_2 + \frac{1}{2} \beta h (s_1 + s_2)} \cdot e^{\beta J s_2 s_3 + \frac{1}{2} \beta h (s_2 + s_3)} \dots \\ &= \sum_{s_1, \dots, s_N} T_{s_1 s_2} T_{s_2 s_3} \dots T_{s_N s_1} = \text{tr } T^N. \end{aligned} \quad (4.17)$$

Die dabei auftretende *Transfermatrix*

$$T = \begin{pmatrix} e^{\beta(J+h)} & e^{-\beta J} \\ e^{-\beta J} & e^{\beta(J-h)} \end{pmatrix} \quad (4.18)$$

ist symmetrisch und positivitätserhaltend,

$$T = T^\dagger \quad \text{und} \quad T_{ss'} > 0. \quad (4.19)$$

Zur weiteren Auswertung diagonalisieren wir diese Matrix mit einer Drehung R ,

$$T = RDR^{-1}, \quad R = \begin{pmatrix} \cos \gamma & -\sin \gamma \\ \sin \gamma & \cos \gamma \end{pmatrix}, \quad D = \begin{pmatrix} \lambda_+ & 0 \\ 0 & \lambda_- \end{pmatrix}. \quad (4.20)$$

Die beiden reellen Eigenwerte sind positiv,

$$\lambda_\pm = e^{\beta J} \left(\cosh \beta h \pm \sqrt{\sinh^2 \beta h + e^{-4\beta J}} \right), \quad (4.21)$$

und λ_+ ist offensichtlich der größere der beiden Eigenwerte. Der Drehwinkel γ in (4.20) berechnet sich aus

$$\sin 2\gamma = \frac{e^{-2\beta J}}{\sqrt{\sinh^2 \beta h + e^{-4\beta J}}}, \quad \cos 2\gamma = \frac{\sinh \beta h}{\sqrt{\sinh^2 \beta h + e^{-4\beta J}}}. \quad (4.22)$$

Eingesetzt in die Zustandssumme ergibt sich

$$Z_{\Lambda}(\beta, h) = \text{tr } T^N = \lambda_+^N + \lambda_-^N = \lambda_+^N (1 + p^N), \quad p = \frac{\lambda_-}{\lambda_+} < 1. \quad (4.23)$$

Wichtige Größen der Thermodynamik sind damit schon durch die Eigenwerte der Transfermatrix bestimmt. Zum Beispiel ist die freie Energiedichte

$$f_{\Lambda}(\beta, h) = \frac{1}{N} F_{\Lambda}(\beta, h) = -\frac{1}{\beta} \log \lambda_+ - \frac{1}{\beta N} \log(1 + p^N). \quad (4.24)$$

Im thermodynamischen Limes $N \rightarrow \infty$ strebt p^N gegen Null und f ist proportional zum Logarithmus des größten Eigenwertes der Transfermatrix,

$$\lim_{N \rightarrow \infty} f_{\Lambda}(\beta, h) = f(\beta, h) = -\frac{1}{\beta} \log \lambda_+. \quad (4.25)$$

Die innere Energiedichte wird mit (4.11) zu

$$u_{\Lambda}(\beta, h) = \frac{1}{N} U_{\Lambda}(\beta, h) = -\frac{\partial}{\partial \beta} \left(\log \lambda_+ + \frac{1}{N} \log(1 + p^N) \right). \quad (4.26)$$

Für ein verschwindendes Magnetfeld $h = 0$ oder im thermodynamischen Grenzfall $N \rightarrow \infty$ vereinfacht sich die Formel für die innere Energiedichte,

$$\begin{aligned} u_{\Lambda}(\beta, 0) &= -\tanh \beta J \left(\frac{1 + (\tanh \beta J)^{N-2}}{1 + (\tanh \beta J)^N} \right) \\ u(\beta, h) &= \lim_{N \rightarrow \infty} u_{\Lambda}(\beta, h) = -\frac{\partial}{\partial \beta} \log \lambda_+. \end{aligned} \quad (4.27)$$

Für die unendlich ausgedehnte ISING-Kette und verschwindendes Magnetfeld ist $u(\beta, 0) = -\tan \beta J$.

Die Magnetisierung berechnet sich mit Hilfe der Transfermatrix wie folgt:

$$\begin{aligned} m &= \langle s_1 \rangle = \frac{1}{Z} \sum_w e^{-\beta H} s_1 \\ &= \frac{1}{Z} \sum_w s_1 T_{s_1 s_2} T_{s_2 s_3} \cdots T_{s_N s_1} = \frac{1}{Z} \text{tr } S T^N, \end{aligned} \quad (4.28)$$

wobei $S = \sigma_3$ die dritte PAULI-Matrix ist. Wegen $T = RDR^{-1}$ und der Zyklizität der

Spur erhalten wir

$$m = \frac{1}{Z} \text{tr} (R^{-1} S R D^N) \quad \text{mit} \quad R^{-1} S R = \begin{pmatrix} \cos 2\gamma & -\sin 2\gamma \\ -\sin 2\gamma & -\cos 2\gamma \end{pmatrix}. \quad (4.29)$$

Mit der obigen Form für die diagonalisierte Transfermatrix finden wir das Resultat

$$m = \frac{1 - p^N}{1 + p^N} \cos 2\gamma \xrightarrow{N \rightarrow \infty} \frac{\sinh \beta h}{\sqrt{\sinh^2 \beta h + e^{-4\beta J}}}. \quad (4.30)$$

Nach (4.12) erhält man die Magnetisierung alternativ auch durch Ableiten der freien Energiedichte (4.24) nach dem Magnetfeld. Schaltet man das Magnetfeld aus, so verschwindet die Magnetisierung (4.30) für alle positiven Temperaturen. Im eindimensionalen ISING-Modell gibt es also keine spontane Magnetisierung. Man kann zeigen, dass *alle* Spinketten mit kurzreichweitiger Wechselwirkung zwischen den Spins keine spontane Symmetrie-Brechung zeigen.

Für die 2-Punktsfunktion findet man auf ähnliche Art für $y \geq x$ die Formel

$$\begin{aligned} \langle s_x s_y \rangle &= \frac{1}{Z} \sum_w e^{-\beta H} s_x s_y \\ &= \frac{1}{Z} \sum_{s_1, s_x, s_y} (T^{x-1})_{s_1 s_x} s_x (T^{y-x})_{s_x s_y} s_y (T^{N+1-y})_{s_y s_1} \\ &= \frac{1}{Z} \text{tr} (S T^{y-x} S T^{N-(y-x)}) \\ &= \frac{1}{Z} \text{tr} ((R^{-1} S R) D^{y-x} (R^{-1} S R) D^{N-(y-x)}) \end{aligned} \quad (4.31)$$

mit den in (4.20,4.29) eingeführten Matrizen D und $R^{-1} S R$. Eine kurze Rechnung liefert

$$\langle s_x s_y \rangle = \cos^2 2\gamma + \frac{p^{y-x} + p^{N-(y-x)}}{1 + p^N} \sin^2 2\gamma, \quad y \geq x. \quad (4.32)$$

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 tatsächlich nur vom Abstand $|y - x|$ von x und y ab. Im thermodynamischen Grenzfall gilt dann

$$\begin{aligned} \lim_{N \rightarrow \infty} \langle s_x s_y \rangle &= \cos^2 2\gamma + e^{-|y-x|/\xi} \sin^2 2\gamma \\ \text{mit} \quad \xi^{-1} &= \log \frac{1}{p} = \log \frac{\lambda_+}{\lambda_-} \xrightarrow{h \rightarrow 0} -\log \tanh \beta J. \end{aligned} \quad (4.33)$$

Für alle positiven Temperaturen ist die Korrelationslänge ξ endlich. Es gilt die *Clusterei-*

genschaft,

$$\langle s_x s_y \rangle - \underbrace{\langle s_x \rangle \langle s_y \rangle}_{=m^2} \xrightarrow{N \rightarrow \infty} \sin^2 2\gamma e^{-|y-x|/\xi} \xrightarrow{|y-x| \rightarrow \infty} 0. \quad (4.34)$$

Das 1-dimensionale ISING-Modell hat keine geordnete Phase für $T > 0$. Nur bei $T = 0$ sind (abhängig von der Reihenfolge der Grenzübergänge) alle Spins auch ohne Magnetfeld parallel ausgerichtet. 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 $\uparrow\uparrow\uparrow\uparrow\downarrow\downarrow\downarrow\downarrow$, wobei die Spins eines Teils der Kette umgedreht sind. Die Trennwand zwischen den beiden Bereichen erhöht die Energie um $\Delta U = 2$, 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 ist. Später werden wir Modelle in mehr als einer Dimension untersuchen. Dann werden wir Phasenübergänge und spontan gebrochene Phasen bei endlichen Temperaturen finden.

4.2.2 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 T eine hermitesche Matrix mit positiven Matrixelementen T_{ij} . Dann hat T einen eindeutigen Eigenvektor zum größten Eigenwert $\|T\|$. 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 T ist

$$\|T\| = \max_{\psi \neq 0} \frac{\|T\psi\|}{\|\psi\|}. \quad (4.35)$$

Es sei nun $\tilde{\Omega} = (\tilde{\Omega}_1, \dots, \tilde{\Omega}_n)^T$ ein Vektor zum maximalen Eigenwert $\|T\|$,

$$(\tilde{\Omega}, T\tilde{\Omega}) = \|T\|(\tilde{\Omega}, \tilde{\Omega}),$$

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 T nicht-negativ sind gilt offensichtlich

$$(\Omega, T\Omega) \geq (\tilde{\Omega}, T\tilde{\Omega}) = \|T\|(\tilde{\Omega}, \tilde{\Omega}) = \|T\|(\Omega, \Omega). \quad (4.36)$$

Mit der SCHWARTZschen Ungleichung folgt weiter

$$(\Omega, T\Omega) \leq \|\Omega\| \|T\Omega\| \leq \|T\| \|\Omega\|^2 = \|T\| \|\tilde{\Omega}\|^2 = \|T\|(\Omega, \Omega). \quad (4.37)$$

Diese beiden Ungleichungen implizieren, dass

$$(\Omega, T\Omega) = \|T\| (\Omega, \Omega).$$

Damit ist Ω genauso wie $\tilde{\Omega}$ ein Eigenvektor zum maximalen Eigenwert von T . Kein Element des reellen Eigenvektors Ω kann wegen

$$0 < \sum_j T_{ij} \Omega_j = (T\Omega)_i = \|T\| \Omega_i \implies \Omega_i > 0$$

verschwinden. Es folgt nun, dass $\tilde{\Omega}$ und Ω *linear abhängig* sein müssen. Um dies einzusehen setzen wir

$$\tilde{\Omega}_j = e^{i\varphi_j} |\tilde{\Omega}_j| \equiv e^{i\varphi_j} \Omega_j$$

in $(\tilde{\Omega}, T\tilde{\Omega}) = (\Omega, T\Omega)$ 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 ist $\tilde{\Omega} = e^{i\varphi} \Omega$. Nun folgt sofort der Satz von PERRON und FROBENIUS: es seien $\Omega^{(1)}$ und $\Omega^{(2)}$ zwei 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.

4.2.3 Verhalten bei tiefen und hohen Temperaturen

Wir interessieren uns hier für das Verhalten des eindimensionalen ISING-Modells bei tiefen und hohen Temperaturen. Im Zustand mit der geringsten Energie sind alle Spins 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 nur durch Umklappen einiger Spins 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

$$\begin{array}{ccc}
 \uparrow \uparrow \uparrow \uparrow \uparrow & -5J - 5h & \downarrow \downarrow \downarrow \downarrow \downarrow & -5J + 5h \\
 \uparrow \uparrow \uparrow \uparrow \downarrow & -J - 3h & \downarrow \downarrow \downarrow \downarrow \uparrow & -J + 3h \\
 \uparrow \uparrow \uparrow \downarrow \downarrow & -J - h & \downarrow \downarrow \downarrow \uparrow \uparrow & -J + h \\
 \uparrow \downarrow \uparrow \downarrow \uparrow & 3J - h & \downarrow \uparrow \downarrow \uparrow \downarrow & 3J + h
 \end{array}$$

Die Zustandssumme hat die folgende *Tieftemperaturentwicklung* für $e^{-K} \ll 1$:

$$\begin{aligned}
 Z = e^{-\beta E_0} & \left(1 + e^{-10h} + 5e^{-\beta(4J+2h)} + 5e^{-\beta(4J+8h)} \right. \\
 & \left. + 5e^{-\beta(4J+4h)} + 5e^{-\beta(4J+6h)} + 5e^{-\beta(8J+4h)} + 5e^{-\beta(8J+6h)} \right)
 \end{aligned}$$

Die systematische Tieftemperaturentwicklung wird im zweidimensionalen 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 das eindimensionale Modell ohne äußeres Magnetfeld und schreiben

$$Z_\Lambda = \sum_w \prod_{\langle x,y \rangle} e^{K s_x s_y}, \quad K = \beta J. \tag{4.38}$$

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

$$Z_\Lambda = (\cosh K)^p \sum_w \prod_{\langle x,y \rangle} (1 + v s_x s_y), \tag{4.39}$$

wobei p die Anzahl nächster Nachbarn-Paare im Gitter ist, also die Anzahl Wechselwirkungsterme. Für ein hyperkubisches Gitter in d Dimensionen ist

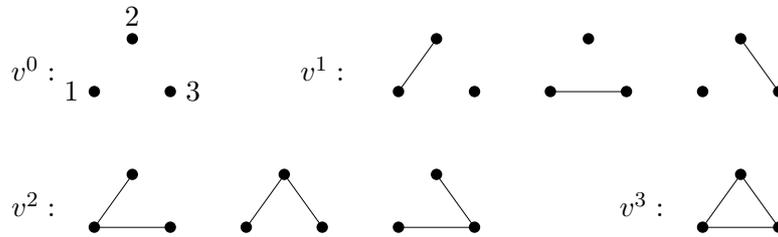
$$p = Vd.$$

Wir betrachten wieder ein einfaches Beispiel eines eindimensionalen periodisches Gitters mit 3 Gitterpunkten. Dann ist $p = 3$ und das Produkt (4.39) hat 3 Faktoren, $(1 + v s_1 s_2)(1 +$

$vs_2s_3)(1 + s_3s_1)$. Entwickeln wir es in Potenzen von v , dann erhalten wir $2^p = 8$ Terme,

$$Z_\Lambda = (\cosh K)^3 \sum_{s_1=-1}^1 \sum_{s_2=-1}^1 \sum_{s_3=-1}^1 \left(1 + v(s_1s_2 + s_2s_3 + s_3s_1) + v^2(s_1s_2s_2s_3 + s_1s_2s_3s_1 + s_2s_3s_3s_1) + v^3(s_1s_2s_2s_3s_3s_1) \right). \quad (4.40)$$

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 (4.40) in der Form $vs_x s_y$ erscheint, hat ein Diagramm der Ordnung n genau n Linien.



Wegen der Identität

$$\sum_{s_x=-1}^1 s_x^n = \begin{cases} 2 & n \text{ gerade} \\ 0 & n \text{ ungerade} \end{cases} \quad (4.41)$$

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 ISING-Kette 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

$$Z_\Lambda = (\cosh K)^N (2^N + 2^N v^N) = 2^N (\cosh^N K + \sinh^N K). \quad (4.42)$$

Die Hochtemperaturentwicklung führt bei der ISINGkette auf das exakte Resultat für die Zustandssumme.

4.2.4 Nullstellen der Zustandssumme

Die Nullstellen von $Z_\Lambda(\beta, h)$ als Funktion der komplexen *Fugazität*

$$z = e^{2\beta h} \quad (4.43)$$

geben nach YANG und LEE Aufschluss über eventuelle Phasenübergänge [35]. 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

$$\begin{aligned} Z_\Lambda(K, z) &= z^{-V/2} \sum_w \exp\left(K \sum_{\langle xy \rangle} s_x s_y\right) \underbrace{z^{(V + \sum s_x)/2}}_{z^k} \\ &= z^{-V/2} \sum_{k=0}^V a_k(K) z^k = z^{-V/2} P_\Lambda(z), \end{aligned} \quad (4.44)$$

bis auf den Faktor $z^{-V/2}$ ein Polynom vom Grad $V = |\Lambda|$ in der Fugazität. Damit ist für das endliche System 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 (4.44) reell sind, ist mit z_k auch \bar{z}_k eine Nullstelle. Da sie zudem positiv sind, liegen die z_k nicht auf der positiven reellen Achse. Die Menge der Spinkonfigurationen 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,

$$Z_\Lambda(K, z) = \sum_w e^{-\beta H(w, h)} \stackrel{w' \equiv -w}{=} \sum_{w'} e^{-\beta H(w', -h)} = Z_\Lambda(K, 1/z). \quad (4.45)$$

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,

$$P_\Lambda(z) = z^V P_\Lambda(1/z) \quad \text{oder} \quad a_k = a_{V-k} > 0, \quad (4.46)$$

Für das eindimensionale ISING-Modell können wir die Nullstellen der Zustandssumme (4.23) 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 (4.21) 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

$$\sin\frac{n\pi}{2N} \cos\theta_n = \sqrt{\sin^2\theta_n - e^{-4K}} \cos\left(\frac{n\pi}{2N}\right).$$

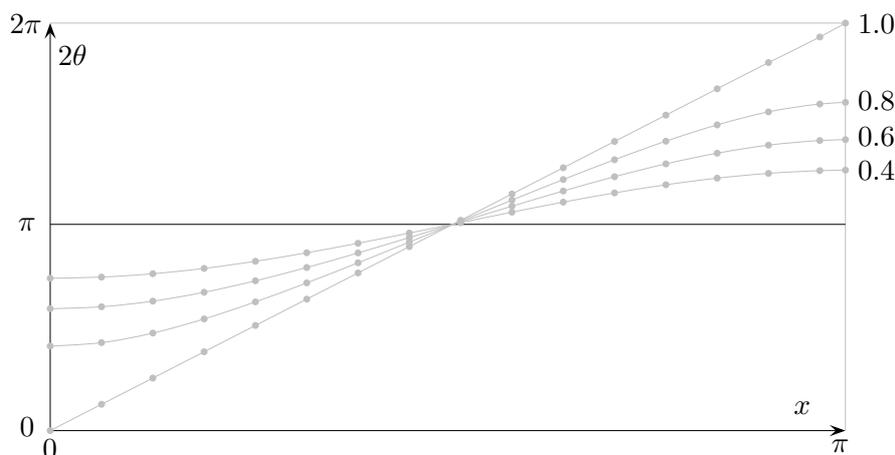
Quadrieren wir diese Gleichung und benutzen $\cos^2 = 1 - \sin^2$, so finden wir folgende Formeln für die halben Phasen θ_n der YANG-LEE Nullstellen $z_n = \exp(2i\theta_n)$,

$$\cos\theta_n(K) = \sqrt{1 - e^{-4K}} \cos\left(\frac{n\pi}{2N}\right), \quad n = 1, 3, \dots, 2N - 1. \quad (4.47)$$

Da der Wurzelfaktor 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,

$$2\theta = 2 \arccos(\alpha \cos x) \quad \text{mit} \quad \alpha = \sqrt{1 - e^{-4K}},$$

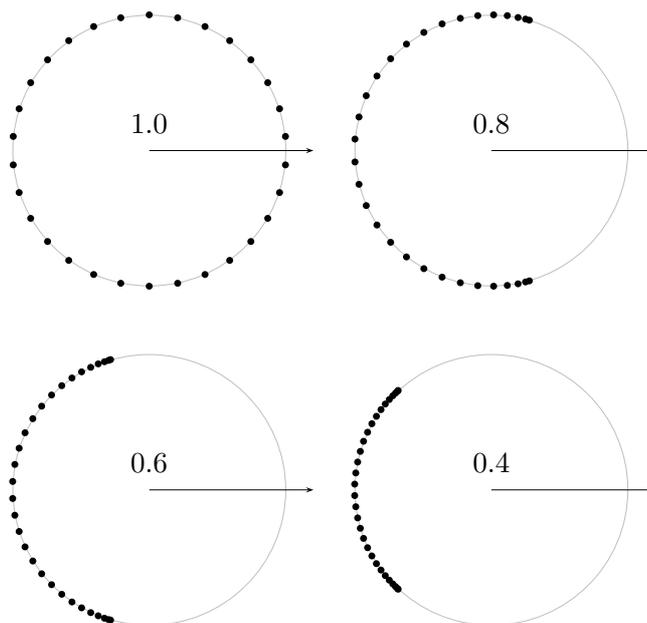
für die Werte $\alpha = 1.0, 0.8, 0.6$ und 0.4 geplottet.



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.

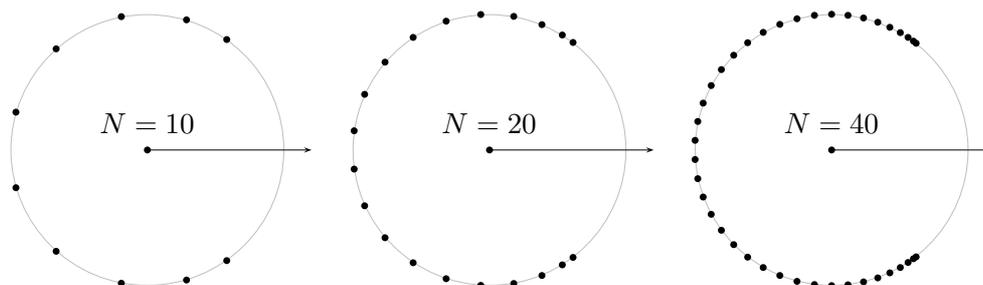


In der nächsten Abbildung sind die Nullstellen für

$$\alpha = \sqrt{1 - e^{-4K}} = 0.9,$$

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

$$\Re z = \cos(2 \arccos 0.9) \quad \text{und} \quad \Im z = \sin(2 \arccos 0.9).$$



4.3 Pottsmodelle

POTTS-Modelle sind verallgemeinerte ISING-Modelle. POTTS fand seine Modelle nach einem entsprechenden Vorschlag von DOMB [34]. In seiner Arbeit untersuchte er die sogenannten \mathbb{Z}_N -Modelle und die nach ihm benannten Modelle. Für beide Familien wird auf jedem Gitterpunkt eine q -wertige Variable $\sigma_x \in \{1, 2, \dots, q\}$ zugeordnet. Offensichtlich gibt es q^V , $V = |\Lambda|$ Konfigurationen

$$w : \Lambda \longrightarrow \mathbb{Z}_q^V, \quad x \longrightarrow \sigma_x \in \{1, 2, \dots, q\}. \quad (4.48)$$

Im POTTS-Modell ist die Energie einer Konfiguration

$$H_\Lambda(w) = -2J \sum_{\langle x,y \rangle} \delta(\sigma_x, \sigma_y) - 2h \sum_x \delta(\sigma_x, 1), \quad (4.49)$$

wobei $\delta(\sigma_x, \sigma_y)$ das KRONECKERSymbol ist. Das $q = 2$ -POTTS-Modell ist identisch zum ISING-Modell. Um dies einzusehen, identifizieren wir $\{1, 2\}$ und $\{1, -1\}$ wie folgt

$$s_x = 2\delta(\sigma_x, 1) - 1, \quad \text{so dass} \quad s_x s_y = 2\delta(\sigma_x, \sigma_y) - 1. \quad (4.50)$$

Die Energien des ($q=2$)-POTTS- und des ISING-Modells unterscheiden sich nur um eine additive Konstante,

$$H_\Lambda^{\text{Potts}}(w) = H_\Lambda^{\text{Ising}}(w) - J\#(\text{nächste Nachbarn}) - h\#(\text{Gitterpunkte}).$$

Dies zeigt, daß für $q = 2$ das POTTS-Modell gleich dem ISING-Modell ist.

Wir berechnen nun die Zustandssumme der Modelle auf dem eindimensionalen Gitter mit periodischen Randbedingungen,

$$Z_\Lambda(\beta, J, h) = \sum_w e^{-\beta H(w)}. \quad (4.51)$$

Wir machen wieder Gebrauch von der Transfermatrix-Methode. Eine mögliche Wahl für diese Matrix ist

$$T = \begin{pmatrix} \zeta z & z & \dots & z \\ 1 & \zeta & \dots & 1 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 1 & 1 & \dots & \zeta \end{pmatrix}, \quad \zeta = e^{2K}, \quad z = e^{2\beta h}. \quad (4.52)$$

Zur Bestimmung der Eigenwerte berechnen wir das charakteristische Polynom. Dazu ziehen wir die zweite Reihe von $T - \lambda \mathbb{1}$ von den darunterliegenden Reihen ab. Danach ad-

dieren wir die dritte und alle nachfolgenden Spalten zur zweiten Spalte. Auf diese Weise finden wir

$$\begin{aligned}
\det(T - \lambda) &= \det \begin{pmatrix} \zeta z - \lambda & z & z & \dots & z \\ 1 & \zeta - \lambda & 1 & \dots & 1 \\ 1 & 1 & \zeta - \lambda & \dots & 1 \\ \vdots & \vdots & & \ddots & \vdots \\ 1 & 1 & 1 & \dots & \zeta - \lambda \end{pmatrix} \\
&= \det \begin{pmatrix} \zeta z - \lambda & z(q-1) & z & \dots & z \\ 1 & \zeta + q - 2 - \lambda & 1 & \dots & 1 \\ 0 & 0 & \zeta - 1 - \lambda & \dots & 0 \\ \vdots & & & \ddots & \\ 0 & & 0 & \dots & \zeta - 1 - \lambda \end{pmatrix} \\
&= \{\lambda^2 - (\zeta z + \zeta + q - 2)\lambda + z(\zeta - 1)(\zeta + q - 1)\} \{\zeta - 1 - \lambda\}^{q-2}
\end{aligned}$$

Dies führt auf den $q - 2$ -fach entarteten Eigenwert $\zeta - 1$ und die einfachen Eigenwerte λ_{\pm} , die Wurzeln der quadratische Gleichung

$$\lambda^2 - (\zeta z + \zeta + q - 2)\lambda + z(\zeta - 1)(\zeta + q - 1) = 0. \quad (4.53)$$

Es ergibt sich der folgende explizite Ausdruck für die Zustandssumme

$$Z_{\Lambda}(\zeta, z) = \lambda_+^N + \lambda_-^N + q'(\zeta - 1)^N, \quad q' = q - 2 \quad (4.54)$$

mit den Wurzeln

$$\begin{aligned}
\lambda_{\pm} &= \frac{1}{2} \left((z + 1)\zeta + q' \pm \sqrt{(\zeta z - \zeta - q')^2 + 4(q - 1)z} \right) \\
&= e^{\beta h} \left(e^{2K} \cosh \beta h + q' e^{-\beta h} \pm \sqrt{(e^{2K} \sinh \beta h - q' e^{-\beta h})^2 + (q - 1)} \right), \quad (4.55)
\end{aligned}$$

wobei wir $q - 2 = 2q'$ gesetzt haben. Für $q = 2$ ist die Zustandssumme proportional zu derjenigen des ISING-Modells. Im thermodynamischen Grenzfall $N \rightarrow \infty$ werden die thermodynamischen Potentiale von dem größten Eigenwert λ_+ der Transfermatrix bestimmt. Zum Beispiel finden wir folgende freie Energiedichte für das eindimensionale POTT-Modell mit q -wertiger Gittervariablen,

$$\begin{aligned}
f(K, \beta h) &= 2K + \beta h + \log \left(\cosh \beta h + q' e^{-2K - \beta h} \right. \\
&\quad \left. + \sqrt{(\sinh \beta h - q' e^{-2K - \beta h})^2 + (q - 1)e^{-4K}} \right). \quad (4.56)
\end{aligned}$$

Dualitätsrelationen: Die Funktion

$$\begin{aligned}\tilde{Z}_\Lambda(\zeta, z) &= ((\zeta - 1)(z - 1))^{-N/2} Z_\Lambda(\zeta, z) \\ &= q' \left(\frac{\zeta - 1}{z - 1} \right)^{N/2} + \left(\frac{\lambda_+}{\sqrt{(\zeta - 1)(z - 1)}} \right)^N + \left(\frac{\lambda_-}{\sqrt{(\zeta - 1)(z - 1)}} \right)^N\end{aligned}$$

geht unter der Dualitätstransformation

$$(\zeta^* - 1)(z - 1) = q \quad , \quad (z^* - 1)(\zeta - 1) = q \quad (4.57)$$

in sich über,

$$\tilde{Z}_\Lambda(\zeta, z) = \tilde{Z}_\Lambda(\zeta^*, z^*) \quad (4.58)$$

Die Beziehungen (4.57) definieren zwei gebrochen lineare MÖBIUS-Transformationen,

$$\zeta^* = \frac{z + q - 1}{z - 1} \quad \text{und} \quad z^* = \frac{\zeta + q - 1}{\zeta - 1}, \quad (4.59)$$

und bilden verallgemeinerte Kreislinien in verallgemeinerte Kreislinien ab. 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 (4.57). Für den ersten Term ist dies evident, für die beiden anderen Terme weniger.

Für das ISING-Modell hat die Zustandssumme auf der rechten Seite in

$$Z_\Lambda(\zeta, z) = \left(\frac{(\zeta - 1)(z - 1)}{(\zeta^* - 1)(z^* - 1)} \right)^{N/2} Z_\Lambda(\zeta^*, z^*) \quad (4.60)$$

Nullstellen bei

$$\zeta^* = e^{2K^*} > 0 \quad \text{und} \quad z^* = e^{2i\theta_n(K^*)}, \quad (4.61)$$

wobei $\theta_n^*(K^*) \in \mathbb{R}$ in (4.47) gegeben ist. Mit der inversen Dualitätstransformation

$$\zeta \equiv e^{2K} = \frac{z^* + 1}{z^* - 1} = -i \cot \theta_n(K^*) \quad (4.62)$$

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 [36].

4.4 Simulation des 1d Ising Modells

Das Programm `ising1d.c` simuliert das eindimensionale ISING-Modell. 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 88, 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 Magnetisierung im File `iisingT=2.0` gespeichert. Dieser File befindet sich im Unterverzeichnis `.is1data` des Verzeichnisses, aus dem das Programm `ising1d.c` aufgerufen wird.

ising1d.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;mittel1=0;
        for (j=0;j<M;j++){
            mcsweep(s);
            mittel1=mittel1+moments(1,s);
        };
        printf("angenommen_%.2f\n", (float)ann/(N*MA*M));
        fprintf(fp, "%4.1f_%%6.3f\n", h, 2*mittel1/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 nn, si, s[N], test[3][5];
unsigned int j, k;
double mittel1;
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 `ising1d.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·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);

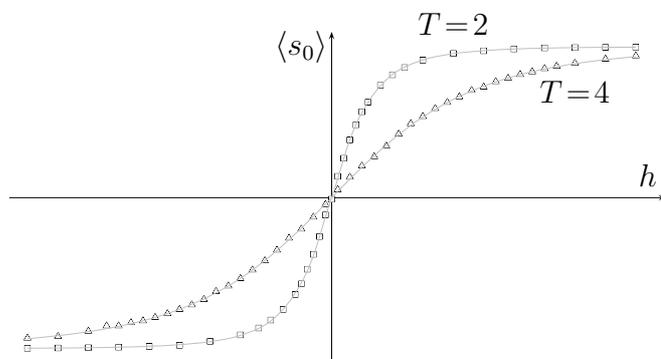
```

```

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 (4.30) im thermodynamischen Grenzfall $N \rightarrow \infty$. Die Übereinstimmung zwischen den MC-Daten für $N = 128$ und der exakten Lösung für $N = \infty$ ist bemerkenswert.

4.5 Aufgaben

Aufgabe 1) 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 2) 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 des Programms aus Aufgabe 1.

Kapitel 5

Approximationen

Wir besprechen hier die grobe Molekularfeldnäherung für Spinmodelle in beliebigen Dimensionen sowie die Hochtemperaturentwicklung in Potenzen von $v = \tanh \beta J$ und die Tieftemperaturentwicklung in Potenzen von $e^{-2\beta J}$. In beiden Entwicklungen werden die Terme einer festen Ordnung durch eine bestimmte Klasse von Graphen auf dem Gitter charakterisiert.

5.1 Molekularfeldnäherung

Da man nur wenige statistisch-mechanische Modelle explizit berechnen kann, ist man auf Näherungsmethoden angewiesen. Eine solche liefert die Molekularfeldnäherung. Diese Näherung geht auch unter anderen Namen: mean field approximation, CURIE-WEISS-Näherung (für Ferromagnete) oder BRAGG-WILLIAMS-Näherung (für Gittergase). Molekularfeldnäherungen sind relativ leicht zu bekommen und geben schon qualitativ richtige Resultate.

Bei der Molekularfeldnäherung (MFA) ersetzt man in der Energie

$$H = -\frac{1}{2} \sum_{\langle x,y \rangle} J_{xy} s_x s_y - h \sum_x s_x, \quad (5.1)$$

die Wechselwirkung von s_x mit seinen nächsten Nachbarn durch eine mittlere Wechselwirkung mit allen Spins,

$$J_{xy} \longrightarrow \frac{1}{V} \sum_y J_{xy} = \tilde{J}. \quad (5.2)$$

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,

$$H \longrightarrow H_{\text{MF}} = -V \left\{ \frac{1}{2} \tilde{J} m^2(s) + h m(s) \right\}, \quad m(s) = \frac{1}{V} \sum s_x. \quad (5.3)$$

Für das ISING-Modell auf dem d -dimensionalen Gitter ist

$$J_{xy} = \begin{cases} J & x, y \text{ nächste Nachbarn} \\ 0 & \text{sonst,} \end{cases}$$

und entsprechend ist $\tilde{J} = 2dJ$. Für dieses Modell sind die Werte für das mittlere Feld $m(s)$ aus der Menge

$$M \in \left\{ -1, -1 + \delta, -1 + 2\delta, \dots, 1 - \delta, 1 \right\}, \quad \delta = \frac{2}{V}. \quad (5.4)$$

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

$$d(m) = \frac{V!}{\left[\frac{1}{2}V(1+m) \right]! \left[\frac{1}{2}V(1-m) \right]!}. \quad (5.5)$$

Spinkonfigurationen. Nach der STIRLINGSchen Formel ist

$$\log(n!) = n(\log n - 1) + o(n), \quad (5.6)$$

und wir finden für die Zustandssumme die Näherungsformel

$$Z_{\text{MF}} = \sum_{m \in M} d(m) e^{-\beta H_{\text{MF}}(m)} = \sum_m e^{-\beta V u_{\text{MF}}(m)} \quad (5.7)$$

mit dem effektiven Potential

$$\begin{aligned} u_{\text{MF}}(m) &\longrightarrow -\frac{1}{2} \tilde{J} m^2 - h m \\ &+ \frac{1+m}{2\beta} \log \frac{1+m}{2} + \frac{1-m}{2\beta} \log \frac{1-m}{2} + \frac{o(V)}{V}. \end{aligned} \quad (5.8)$$

Für $m \in M$ ist

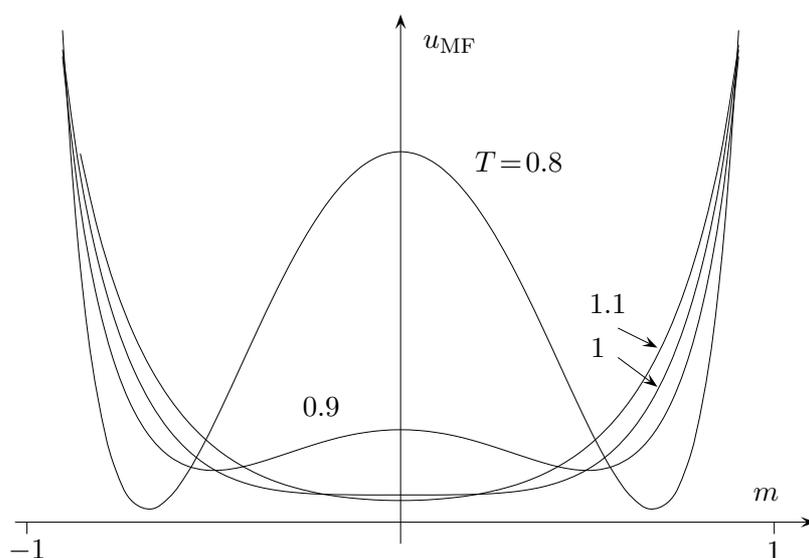
$$P_{\text{MF}}(m) = \frac{1}{Z_{\text{MF}}} e^{-\beta V u_{\text{MF}}(m)} \quad (5.9)$$

die Wahrscheinlichkeit dafür, das mittlere Feld m zu finden. Im thermodynamischen Grenzfall $V \rightarrow \infty$ strebt der Term $o(V)/V$ gegen Null und m wird zu einem kontinuierlichen Feld mit Werten im Intervall $[-1, 1]$. Dann wird P_{MF} zu einer Wahrscheinlich-

keitsdichte für das mittlere Feld.

In der folgenden Abbildung ist das effektive Potential in der Molekularfeldapproximation für $V \rightarrow \infty$, $\tilde{J}=1$, $h=0$ und verschiedene Temperaturwerte eingezeichnet. Für $T < T_c$ hat u_{MF} ein Maximum am Ursprung und zwei Minimas bei $\pm m_0$, für $T > T_c$ ein globales Minimum am Ursprung. Die Werte des Potentials an den Endpunkten und am Ursprung sind

$$\begin{aligned} u_{\text{MF}}(h=0, m=0) &= -T \log 2 \\ u_{\text{MF}}(h=0, m=1) &= -\tilde{J}/2. \end{aligned}$$



Das effektive Potential ist minimal bei

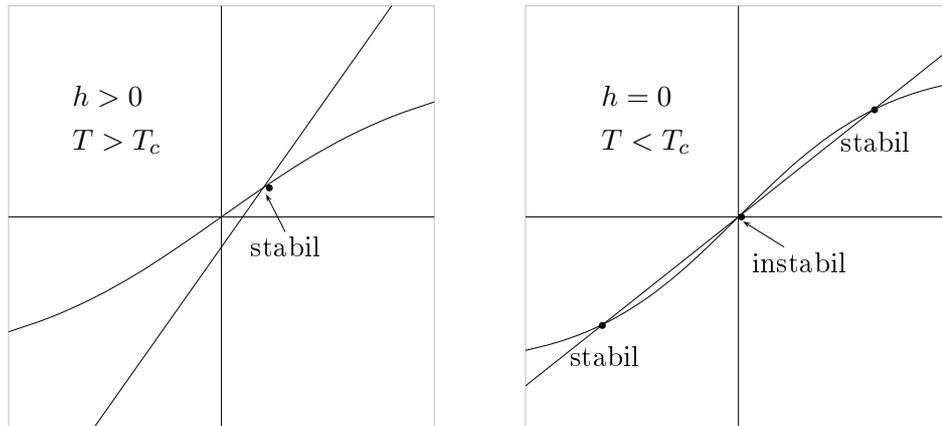
$$\tilde{J}m_0 + h = \frac{1}{2\beta} \log \frac{1+m_0}{1-m_0} \implies m_0 = \tanh(\beta\tilde{J}m_0 + \beta h). \quad (5.10)$$

Diese transzendente Gleichung für das mittlere Feld heisst *Selbstkonsistenzgleichung*. Setzen wir $x = \beta\tilde{J}m_0 + \beta h$, so lautet die Bestimmungsgleichung für x

$$\frac{1}{\tilde{J}}(Tx - h) = \tanh x. \quad (5.11)$$

Sie hat 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, d.h. wenn gilt

$$T > T_c = \tilde{J} = 2dJ. \quad (5.12)$$



Die Lösung $m_0(h)$ strebt für $h \rightarrow 0$ gegen Null. Oberhalb der kritischen Temperatur ist die Suszeptibilität

$$\chi = \left(\frac{\partial m_0}{\partial h} \right) \Big|_{h=0} \quad (5.13)$$

gegeben durch das CURIE-WEISSsche Gesetz,

$$\chi \stackrel{m_0(0)=0}{=} \beta(\tilde{J}\chi + 1) \implies \chi = \frac{1}{T - T_c}. \quad (5.14)$$

Es ist Brauch, die dimensionslose Temperaturdifferenz

$$\epsilon = \frac{T_c - T}{T_c} \quad (5.15)$$

einzuführen. Die Divergenz der Suszeptibilität in der Nähe des kritischen Punktes bei T_c (für $T \downarrow T_c$ oder $T \uparrow T_c$) ist

$$\chi \sim |\epsilon|^{-\gamma}. \quad (5.16)$$

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 Gleichung (5.10). Für $h \downarrow 0$ ergibt sich eine spontane Magnetisierung $m_0(T) > 0$. In der Nähe der kritischen Temperatur ist m_0 klein und wir können $\tanh \beta \tilde{J} m$ in (5.10) mit $h = 0$ 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,

$$m_0 = 0 \quad \text{und} \quad m_0 = \pm \left(\frac{3}{\beta \tilde{J}} \right)^{1/2} (\beta \tilde{J} - 1)^{1/2}. \quad (5.17)$$

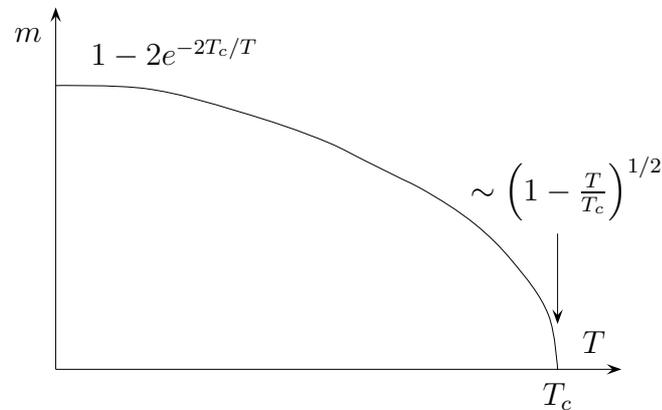
Die erste Lösung gehört zum ungeordneten paramagnetischen Hochtemperaturzustand und die beiden anderen Lösungen zum geordneten ferromagnetischen Tieftemperaturzustand. Die geordneten Zustände haben ein geringeres effektives Potential. Setzen wir $\tilde{J} = T_c$, so verschwindet die spontane Magnetisierung für $T \uparrow T_c$ gemäß

$$m_0(T) = 3^{1/2} \frac{T}{T_c} \left(\frac{T_c - T}{T_c} \right)^{1/2}. \quad (5.18)$$

Die 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

$$m_0(T) \sim \epsilon^\beta. \quad (5.19)$$

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 Sprunges ist $3k/2$.

Die Magnetisierung als Funktion des Magnetfeldes h folgt aus der Selbstkonsistenzgleichung (5.10) wenn wir die rechte Seite dieser Gleichung für $T = T_c$ bis zur dritten Ordnung in h entwickeln,

$$m_0 = m_0 + \beta_c h - \frac{1}{3} (m_0 + \beta_c h)^3 + \dots \quad (5.20)$$

¹Nicht mit der inversen Temperatur verwechseln!

Für sehr kleine m_0 und h dürfen wir $\beta_c h \ll m_0$ annehmen. Dann finden wir

$$m_0 \sim (3\beta_c h)^{1/3}, \quad (T = T_c), \quad (5.21)$$

was mit unserer Annahme verträglich ist. Im Allgemeinen hat man

$$m_0 \sim h^{1/\delta}, \quad (T = T_c). \quad (5.22)$$

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

$$\tilde{J} = qJ \quad (5.23)$$

abhängt, und nicht von der Dimension des Gitter, ist eine der großen Schwächen der Näherung. Die einfache MFA sagt für das eindimensionale ISING-Modell 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 besser wenn die Anzahl nächster Nachbarn (die Koordinationszahl) zunimmt.

Gitter	d	q	T_{MF}/T_c	T_c/T_{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

(5.24)

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 Lösung von ONSAGER für das 2-dimensionale ISING-Modell 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 ISING-Modell 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 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.

5.2 Hochtemperaturentwicklungen

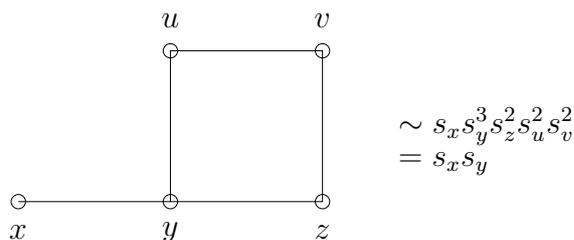
Neben Monte-Carlo Simulationen und der Molekularfeldapproximation sind die Hoch- und Tieftemperaturentwicklungen in Gittertheorien von großer Bedeutung. Bei der Tieftemperaturentwicklung studiert man die Abweichungen vom Zustand minimaler Energie (oder Wirkung in der Feldtheorie). Sie entspricht der 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.

Analog zum eindimensionalen Fall schreiben wir für sehr hohe Temperaturen oder $K \ll 1$ beziehungsweise $v = \tanh K \ll 1$ die Zustandssumme des 2-dimensionalen ISING-Modells auf dem quadratischen Gitter für verschwindendes Magnetfeld wie folgt um

$$Z = \sum_w \prod_{\langle xy \rangle} e^{K s_x s_y} = (\cosh K)^P \sum_w \prod_{\langle xy \rangle} (1 + v s_x s_y)$$

$$= (\cosh K)^P \sum_w \left(1 + v \sum_{\langle xy \rangle} s_x s_y + v^2 \sum_{\langle xy \rangle \neq \langle x'y' \rangle} s_x s_y s_{x'} s_{y'} + \dots \right). \quad (5.25)$$

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

$$Z = (\cosh K)^P 2^V \sum_{\ell=0}^P g_\ell v^\ell, \quad (5.26)$$

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 Hochtemperaturentwicklung

$$Z = (\cosh K)^P 2^V \left(1 + Vv^4 + 2Vv^6 + \frac{1}{2}(V^2 + 7V)v^8 + \dots \right). \quad (5.27)$$

Den thermodynamischen Grenzfall erhält man durch formales Rechnen mit Potenzreihen. Dazu machen wir wegen

$$Z = \exp(-V\beta f) \quad (5.28)$$

folgenden Ansatz für die frei Energiedichte,

$$e^{-\beta f} = (\cosh K)^{P/V} \cdot 2 \cdot \sum_{\ell=0}^{\infty} c_{\ell} v^{\ell}. \quad (5.29)$$

Aus (5.28) folgt dann mit (5.26)

$$\begin{aligned} 1 + \sum_{\ell \geq 1} g_{\ell} v^{\ell} &= \left(1 + \sum_{\ell \geq 1} c_{\ell} v^{\ell} \right)^V \\ &= 1 + \binom{V}{1} (c_1 v + c_2 v^2 + \dots) \\ &\quad + \binom{V}{2} (c_1 v + c_2 v^2 + \dots)^2 + \dots \end{aligned}$$

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

$$\begin{aligned} &Vv^4 + 2Vv^6 + \frac{1}{2}(V^2 + 7V)v^8 + \dots \\ &= Vc_4v^4 + Vc_6v^6 + \left(Vc_8 + \frac{1}{2}(V^2 - V)c_4^2 \right)v^8 + \dots \end{aligned}$$

oder $c_4 = 1$, $c_6 = 2$ und $c_8 = 4$. Deshalb ist

$$e^{-\beta f} = 2(\cosh K)^2 (1 + v^4 + 2v^6 + 4v^8 + O(v^{10})). \tag{5.30}$$

Daraus kann man die Potenzreihe für die freie Energiedichte ausrechnen.

Als Übung sollten Sie die Graphen für die Hochtemperaturentwicklung des 3-dimensionalen ISING-Modells mit $P = 3V$ untersuchen. Sie sollten folgende Reihe

$$Z = (\cosh K)^{3V} \cdot 2^V \cdot \left(1 + 3Vv^4 + 22Vv^6 + \frac{1}{2} \{9V(V-1) + 375V\} v^8 + \dots \right) \tag{5.31}$$

erhalten.

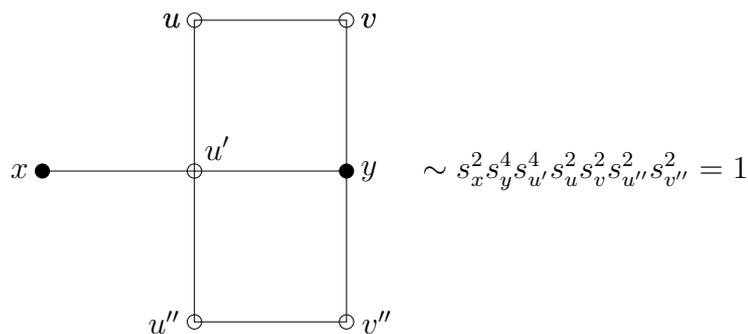
Suszeptibilität: Oberhalb der kritischen Temperatur verschwindet für $h = 0$ die Magnetisierung, $\langle s_x \rangle = 0$ und die Suszeptibilität ist

$$\chi = \frac{1}{V} \sum_{xy} \langle s_x s_y \rangle = \sum_y \langle s_x s_y \rangle. \tag{5.32}$$

Nun wird wieder jedem Term in der Hochtemperaturentwicklung

$$\langle s_x s_y \rangle = \frac{\cosh^P K}{Z} \sum_w s_x s_y \left(1 + v \sum_{\langle uv \rangle} s_u s_v + v^2 \sum_{\langle uv \rangle \neq \langle u'v' \rangle} s_u s_v s_{u'} s_{v'} + \dots \right) \tag{5.33}$$

ein eindeutiger Graph zugeordnet. Zum Beispiel



Dieser Graph trägt mit 2^V zur Summe über alle Konfigurationen in (5.33) 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 (5.27) 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 könnten 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

$$\text{Ord}(x) + \text{gerade Zahl} = \text{ungerade},$$

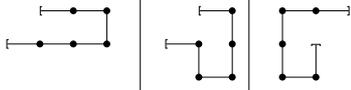
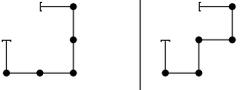
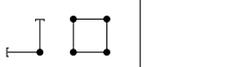
im Gegensatz zu der Forderung, dass diese Zahl gerade sein muss. Also gibt es keinen zulässigen Graphen der Ordnung $< \ell$.

Für das 2-dimensionale ISING-Modell auf dem quadratischen Gitter gilt also

$$\langle s_x s_y \rangle = O(v^{d(x,y)}) = O(e^{-d(x,y)/\xi}), \quad \frac{1}{\xi} = \log \frac{1}{v} \gg 1, \quad (5.34)$$

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 (5.32) 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

$$\langle s_x s_y \rangle = 2v^2 + 4v^4 + 10v^6 + O(v^8) \tag{5.35}$$

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,

$$\chi = 1 + 4v + 12v^2 + 36v^3 + 100v^4 + 276v^5 + 740v^6 + \dots \tag{5.36}$$

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

$$\chi = \sum_{\ell} a_{\ell} K^{\ell}, \quad K = J/T. \tag{5.37}$$

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 (5.37) 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*

$$R = \lim_{\ell \rightarrow \infty} \frac{a_\ell}{a_{\ell-1}} = \frac{J}{T_c}. \quad (5.38)$$

Wir versuchen den kritischen Exponenten γ und K_c in der Interpolationsformel

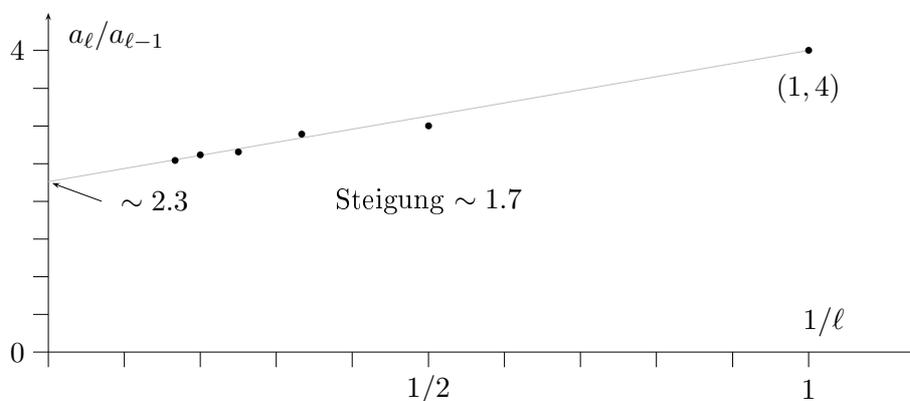
$$f(K) = (1 - K/K_c)^{-\gamma} = 1 + \sum_{\ell=1}^{\infty} \frac{\gamma(\gamma+1)\cdots(\gamma+\ell-1)}{\ell!} \left(\frac{K}{K_c}\right)^\ell \equiv \sum a'_\ell K^\ell$$

so zu wählen, dass diese Reihe mit der Hochtemperaturentwicklung (5.37) 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,

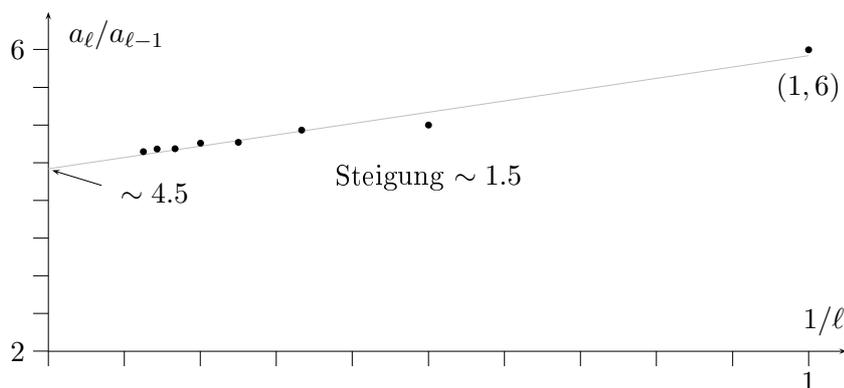
$$\frac{T_c}{T_{\text{MF}}} = \frac{1}{2 \log(1 + \sqrt{2})} \sim 0.5673. \quad (5.39)$$

Für das dreidimensionale ISING-Modell haben GAUNT und SYKES die Hochtemperaturentwicklung bis zur Ordnung 20 berechnet [37]. Die führenden Terme sind

$$\begin{aligned} \chi = & 1 + 6 K + 30 K^2 + 148 K^3 + 706 K^4 + \frac{16804 K^5}{5} \\ & + \frac{47260 K^6}{3} + \frac{7744136 K^7}{105} + \frac{35975026 K^8}{105} + \dots \end{aligned} \quad (5.40)$$

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 $T_{MF} = 6J$ ist

$$\frac{T_c}{T_{MF}} \sim \frac{4.5}{6} = 0.75,$$

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.

5.3 Tieftemperaturentwicklungen

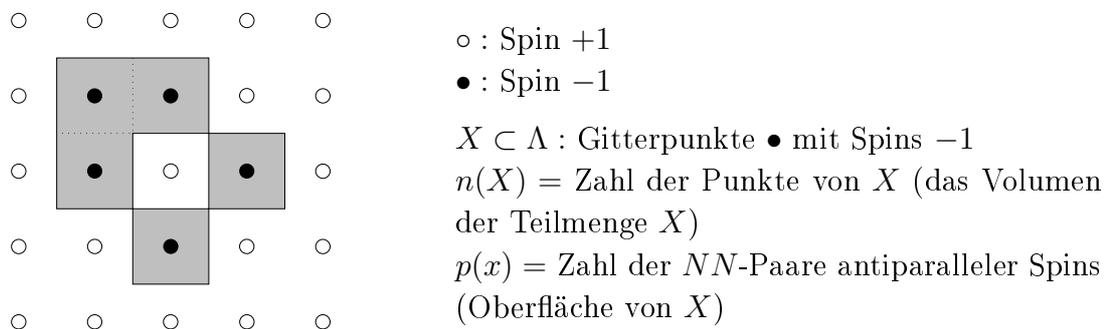
Für ein positives Magnetfeld h hat die geordnete Konfiguration

$$w_0 = \{s_x = 1 | x \in \Lambda\} \tag{5.41}$$

die niedrigste Energie,

$$E_0 = -PJ - Vh. \tag{5.42}$$

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.

Jeder Gitterpunkt \bullet mit Spin -1 gibt einen Beitrag $2h$ zur Energie, jedes nächste Nachbarn-Paar $\bullet\circ$ einen Beitrag $2J$, also ist

$$E(X) = E_0 + 2J p(X) + 2h n(X). \quad (5.43)$$

Ist g_n die Vielfachheit der Anregungsenergie E_n , dann lautet die Zustandssumme

$$Z = e^{-\beta E_0} \sum_n g_n e^{-\beta(E_n - E_0)} = e^{\beta(PJ + Vh)} \Xi \quad (5.44)$$

und Ξ hat folgende Tieftemperaturentwicklung:

$$\Xi(z, \zeta) = \sum_{n=0}^{\infty} z^n F_V(n, \zeta) = \sum_{n=0}^{\infty} z^n \sum_{p=0}^{\infty} \zeta^p G_V(n, p). \quad (5.45)$$

Für eine ferromagnetische Kopplung $J > 0$ ist bei tiefen Temperaturen

$$\zeta = e^{-2\beta J} \ll 1 \quad (5.46)$$

und ζ darf als Entwicklungsparameter gewählt werden. Wir dürfen annehmen, dass h positiv ist, oder dass

$$z = e^{-2\beta h} < 1 \quad (5.47)$$

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 (5.45) ist gleich der Anzahl Konfigurationen X mit Volumen $n(X) = n$ und Oberfläche $p(X) = p$. Die Reihe (5.45) 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

$$\Xi(z, \zeta) = \xi(z, \zeta)^V \quad \text{mit} \quad \xi(z, \zeta) = \sum_{n=0}^{\infty} z^n c_n(\zeta). \tag{5.48}$$

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

$$\xi(z, \zeta) = 1 + z\zeta^4 + z^2(2\zeta^6 - 2\zeta^8) + z^3\left(6\zeta^8 - 14\zeta^{10} + \frac{26}{3}\zeta^{12}\right) + \dots \quad (5.49)$$

Um die freie Energiedichte zu gewinnen, müssen wir die Logarithmus-Funktion in

$$f = -\frac{P}{V}J - h - \frac{1}{\beta} \log \xi \quad (5.50)$$

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

$$\log \xi = \sum_{n=0}^{\infty} z^n g_n(\zeta), \quad g_n(\zeta) = \frac{d}{dV} F_V(n, \zeta)|_{V=0}. \quad (5.51)$$

Für das $2d$ -ISING-Modell erhalten wir

$$\log \xi = z\zeta^4 + z^2\left(2\zeta^6 - \frac{5}{2}\zeta^8\right) + z^3\left(6\zeta^8 - 16\zeta^{10} + \frac{31}{3}\zeta^{12}\right) + \dots, \quad (5.52)$$

was man auch mit (5.49) erhält. Die Magnetisierung gewinnen wir durch Ableiten der freien Energiedichte nach dem Magnetfeld,

$$\begin{aligned} m(\beta, h) &= -\frac{\partial}{\partial h} f \stackrel{(5.50)}{=} 1 + \frac{1}{\beta} \frac{\partial}{\partial h} \log \xi \\ &= 1 - 2z \frac{\partial}{\partial z} \log \xi = 1 - 2 \sum_{n=1}^{\infty} n z^n g_n(\zeta). \end{aligned} \quad (5.53)$$

Die spontane Magnetisierung ist dann

$$m(\beta, h = 0) = 1 - 2 \sum_{n=1}^{\infty} n g_n(\zeta). \quad (5.54)$$

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

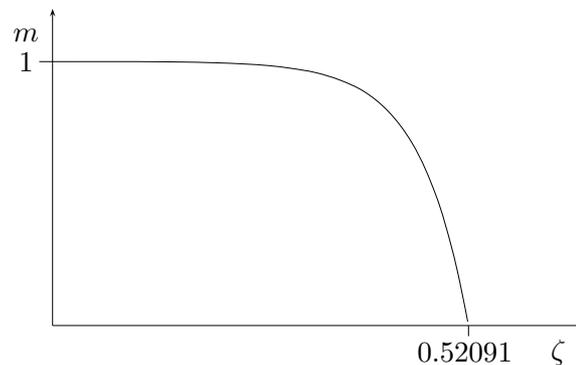
maximale Oberfläche aus n disjunkten Quadraten der Seitenlänge und hat die Oberfläche $p = 4n$. Deshalb hat die spontane Magnetisierung m_0 eine (formale) Potenzreihe in ζ . In einer Dimension oder für ein unendlich langes Gitter mit endlicher Breite gilt dies nicht. Es gibt dann Graphen fester Oberfläche mit beliebig großem Volumen.

Für das $2d$ quadratische ISING-Modell sind

$$\begin{aligned}
 g_1 &= \zeta^4 \\
 2g_2 &= 4\zeta^6 - 5\zeta^8 \\
 3g_3 &= 18\zeta^8 - 48\zeta^{10} + 31\zeta^{12} \\
 4g_4 &= 4\zeta^8 + 72\zeta^{10} - 340\zeta^{12} + \dots \\
 5g_5 &= 40\zeta^{10} + 215\zeta^{12} + \dots \\
 6g_6 &= 12\zeta^{10} + 240\zeta^{12} + \dots \\
 7g_7 &= 154\zeta^{12} + \dots \\
 8g_8 &= 48\zeta^{12} + \dots \\
 9g_9 &= 9\zeta^{12} + \dots \\
 \sum ng_n(\zeta) &= \zeta^4 + 4\zeta^6 + 17\zeta^8 + 38\zeta^{10} + 357\zeta^{12} + \dots
 \end{aligned} \tag{5.55}$$

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 $p(X) = 12$.

In der folgenden Abbildung ist die spontane Magnetisierung (5.54) mit $\sum ng_n$ aus (5.55) geplottet.



Die Extrapolation ergibt eine verschwindende Magnetisierung bei

$$\zeta_c = 0.52091 \quad \text{oder} \quad T_c = 3.06665 \cdot J \sim 0.76666 \cdot T_{\text{MF}}. \tag{5.56}$$

Die Tieftemperaturreihe für die Magnetisierung,

$$m_0 = \sum a_n y^n = 1 - 2y^2 - 8y^3 - 34y^4 - 152y^5 - 714y^6 + \dots, \tag{5.57}$$

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.

$$m_0 \sim \left(1 - \frac{y}{y_c}\right)^\beta = \sum a_n y^n \implies \frac{a_n}{a_{n-1}} = \frac{1}{y_c} - \frac{1 + \beta}{y_c} \frac{1}{n}. \tag{5.58}$$

In [38] 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

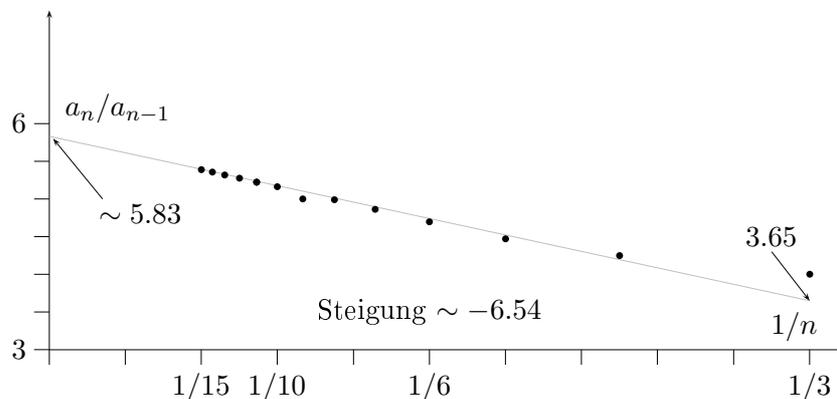
Die Quotienten a_n/a_{n-1} sind in der nächsten Abbildung über n aufgetragen. Die Steigung der interpolierenden Gerade ist etwa -6.54 und der Schnittpunkt mit der Ordinate bei $1/y_c \sim 5.83$. Daraus ergibt sich folgende Schätzung für die kritische Temperatur

$$\frac{1}{y_c} = e^{4\beta_c J} = 5.83 \implies T_c = 2.269 \cdot J = 0.567 \cdot T_{MF}. \tag{5.59}$$

Dies ist nahe am exakten Wert (5.39). Für den kritischen Koeffizienten β finden wir

$$\beta \sim 6.54/5.83 - 1 \sim 0.122. \tag{5.60}$$

anstelle des exakten Wertes $\beta = 1/8 = 0.125$.



5.4 Aufgaben zu Kapitel 5

Aufgabe 1: Hochtemperaturentwicklung

Betrachten Sie das dreidimensionale Ising-Modell ohne Magnetfeld:

$$H = -J \sum_{\langle xy \rangle} s_x s_y \quad \text{mit} \quad s_x, s_y \in \{-1, 1\} .$$

Bestimmen Sie die Zustandssumme bis zur Ordnung v^8 ($v = \tanh(\beta J)$) in der Hochtemperaturentwicklung. Geben Sie weiterhin für $e^{-\beta f}$ (f ist die Dichte der Freien Energie) die Entwicklung ebenfalls bis zur Ordnung v^8 an.

Aufgabe 2: 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. Bei dieser Näherung wird in der Hamiltonfunktion J_{xy} durch $\frac{\tilde{J}}{V}$ ersetzt. 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.

Kapitel 6

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 Differenzkalkül auf Gittern, einer diskreten Version des äußeren Kalküls.

6.1 Dualität für das $2d$ Ising-Modell

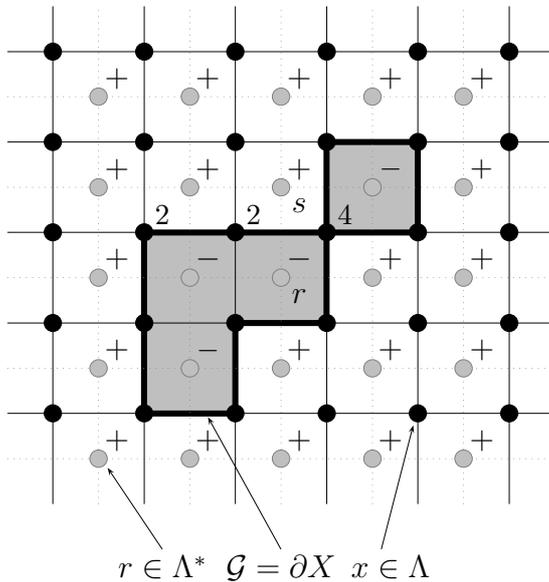
KRAMERS und WANNIER [41] fanden 1941 eine Transformation, welche das $2d$ -ISING-Modell mit $(\beta, h = 0)$ auf ein $2d$ -ISING-Modell mit $(\beta^*, h = 0)$ abbildet. Dabei ist die Temperatur T^* eine monoton abnehmende Funktion der Temperatur T des ursprünglichen Modells und die Hochtemperaturphase 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 [39].

Wir beginnen mit der graphischen Entwicklung der Zustandssumme für hohe Tempe-

raturen,

$$\begin{aligned} Z &= (\cosh K)^P \sum_w \prod_{\langle xy \rangle} (1 + v s_x s_y) = (\cosh K)^P 2^V \sum_{\ell=0}^{\infty} g_{\ell} v^{\ell} \\ &= (\cosh K)^P 2^V \sum_{\mathcal{G}} v^{L(\mathcal{G})} = (\cosh K)^P 2^V \sum_{\mathcal{G}} \prod_x v^{n_x(\mathcal{G})/2}, \end{aligned} \tag{6.1}$$

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 sein 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

$$n_x = 2 - \frac{1}{2}(\sigma_1 \sigma_2 + \sigma_2 \sigma_3 + \sigma_3 \sigma_4 + \sigma_4 \sigma_1) \equiv 2 - \frac{1}{2} \sigma_{p(x)}. \tag{6.2}$$

Setzen wir dies in die Zustandssumme (6.1) ein und berücksichtigen, dass w^* und $-w^*$ zum selben Graphen gehören und jede duale Linie zu zwei Plaquetten gehört, dann folgt

$$Z = \frac{1}{2} (\cosh K)^P 2^V \sum_{w^*} \prod_x (v \cdot v^{-\sigma_{p(x)}/4})$$

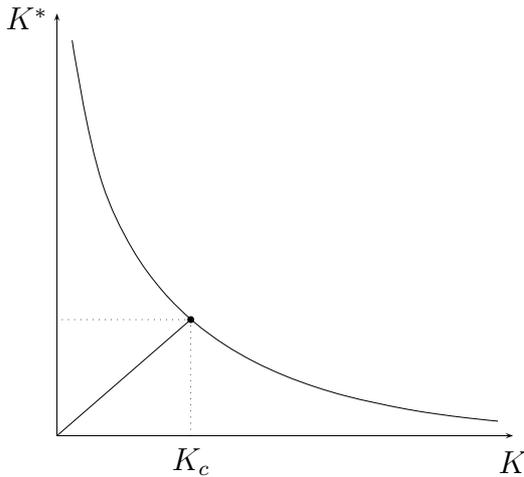
$$\begin{aligned}
&= \frac{1}{2} (\cosh K)^{2V} (2v)^V \sum_{w^*} v^{-\frac{1}{2} \sum_{\langle rs \rangle} \sigma_r \sigma_s} \\
&= \frac{1}{2} (2 \sinh K \cosh K)^V \sum_{w^*} e^{-\beta^* H(\sigma)},
\end{aligned} \tag{6.3}$$

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

$$\sinh 2K \cdot \sinh 2K^* = 1. \tag{6.4}$$



Die Gleichung (6.4) 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

$$\sinh K \cosh K = \frac{1}{2} \sinh 2K \implies (2 \sinh K \cosh K)^2 \stackrel{(6.4)}{=} \frac{\sinh 2K}{\sinh 2K^*}.$$

und wegen (6.3) führt dies auf die Dualitätsrelation

$$\frac{Z(K)}{(\sinh 2K)^{V/2}} = \frac{1}{2} \frac{Z(K^*)}{(\sinh 2K^*)^{V/2}}. \tag{6.5}$$

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

$$T_c = \frac{2J}{\log(1 + \sqrt{2})} \approx 2.2692J \approx 0.5673 T_{\text{MF}}. \quad (6.6)$$

Hätte das ISING-Modell mehrere kritische Punkte, dann würde die Dualitätsrelation (6.5) 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

$$Z = \sum_{\{s\}} \prod_{\langle xy \rangle} (\cosh K + \sinh K s_x s_y) = \sum_{\{s\}} \prod_{\langle xy \rangle} \sum_{k=0}^1 c_k(K) (s_x s_y)^k, \quad (6.7)$$

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 $\partial k(x) = \sum_{y:(yx)} k_{xy}$ eingeführt wurde. Für jede ganze Zahl k ist

$$\sum_{s_x = -1, 1} s_x^n = 2\delta_2(n), \quad \delta_2(n) = \begin{cases} 1 & n \text{ gerade} \\ 0 & n \text{ ungerade} \end{cases}, \quad (6.8)$$

und die Summe über die Spinkonfigurationen kann leicht ausgeführt werden. Damit erhalten wir folgende Formel für die Zustandssumme in beliebigen Dimensionen

$$Z = 2^V \sum_{\{k\}} \prod_{\ell} c_{k_\ell}(K) \prod_x \delta_2(\partial k(x)). \quad (6.9)$$

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 $\{\sigma\}$ 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

$$k_\ell = \frac{1}{2}(1 - \sigma_r \sigma_s). \quad (6.10)$$

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 (6.2) eingeführt wurde. Die rechte Seite ist immer gerade, so dass alle δ -Bedingungen in (6.9) automatisch erfüllt sind. Die Transformation (6.10) 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:

$$\begin{aligned} c_k(K) &= \cosh K e^{k \log \tanh K} \\ &\stackrel{(6.10)}{=} (\cosh K \sinh K)^{1/2} \exp\left(-\frac{1}{2}\sigma_r \sigma_s \log \tanh K\right). \end{aligned}$$

Eingesetzt ergibt sich

$$\begin{aligned} Z &= \frac{1}{2} (2 \cosh K \sinh K)^V \sum_{\{\sigma\}} \exp\left(-\frac{1}{2} \log \tanh K \sum_{\langle rs \rangle} \sigma_r \sigma_s\right) \\ &= \frac{1}{2} (\sinh 2K^*)^{-V} \sum_{\{\sigma\}} \exp\left(K^* \sum_{\langle rs \rangle} \sigma_r \sigma_s\right) \end{aligned} \quad (6.11)$$

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,

$$\langle \sigma_r \sigma_s \rangle = \frac{1}{Z^*} \sum_{\{\sigma\}} \sigma_r \sigma_s \exp \left(K^* \sum_{\langle pq \rangle} \sigma_p \sigma_q \right).$$

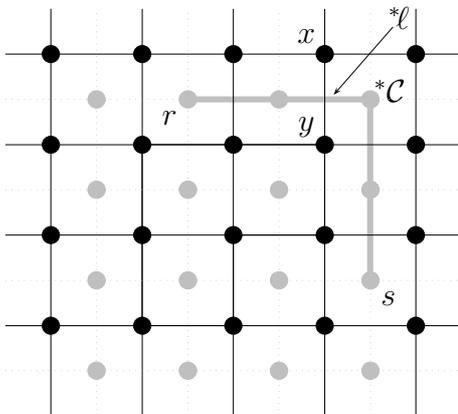
Die Zustandssumme $Z(K^*)$ im Nenner wurde schon „dualisiert“ und braucht nicht weiter betrachtet zu werden. Wir schreiben den Zähler um,

$$\begin{aligned} Z_{rs} &= \sum_{\{\sigma\}} \sigma_r \sigma_s \exp \left(K^* \sum_{\langle pq \rangle} \sigma_p \sigma_q \right) \\ &= \sum_{\{\sigma\}} \sigma_r \sigma_s \prod_{\langle pq \rangle} \sum_{k=0}^1 c_k(K^*) (\sigma_p \sigma_q)^k, \end{aligned}$$

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

$$Z_{rs} = 2^V \sum_{\{k\}} \prod_{*\ell} c_{k_{*\ell}}(K^*) \delta_2(1 + \partial k(r)) \delta_2(1 + \partial k(s)) \prod'_p \delta_2(\partial k(p)), \quad (6.12)$$

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 (6.12) erfüllt sind. Die Darstellung (6.10) 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 :

$$k_{*\ell} = \begin{cases} \frac{1}{2}(1 - s_x s_y) & ^*\ell \notin ^*\mathcal{C} \\ \frac{1}{2}(1 + s_x s_y) & ^*\ell \in ^*\mathcal{C} \end{cases}$$

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 (6.12) 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 (6.11) gelangen wir zu folgender Darstellung

$$Z_{rs} = \frac{1}{2} (\sinh 2K)^{-V} \sum_{\{s\}} \exp \left(\sum_{\langle xy \rangle} K_{xy} s_x s_y \right). \quad (6.13)$$

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.

6.2 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 (6.9)

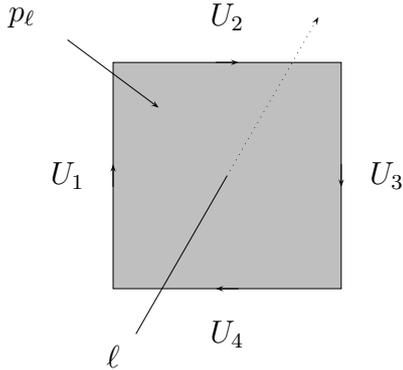
$$Z = 2^V \sum_{\{k\}} \prod_{\ell} c_{k_{\ell}}(K) \prod_x \delta_2(\partial k(x)). \quad (6.14)$$

Wiederum gibt es eine Variable k pro Kante, und entsprechend erhält man in 3 Dimensionen die Divergenz

$$(\partial k)(x) = \sum_{\ell: x \in \partial \ell} k_{\ell}. \quad (6.15)$$

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 (6.14) 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

$$k_\ell = \frac{1}{2} \left(1 - \prod_{^*\ell \in \partial p_\ell} U_{^*\ell} \right) \quad (6.16)$$

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

$$\partial k(x) = 3 - \frac{1}{2} \sum_{^*p \in \partial K_x} \prod_{^*\ell \in \partial ^*p} U_{^*\ell}. \quad (6.17)$$

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 (6.17) das Vorzeichen und die Summe ändert sich entsprechend um 4, 0 oder -4 . Also ändert sich ∂k um eine gerade Zahl. Das die Darstellung (6.16) notwendig ist, werden wir später beweisen.

Das Produkt über alle Kanten (6.14) wird zum Produkt über alle dualen Plaquetten. Setzen wir die Darstellung (6.17) in (6.14) ein, so sind die Kronecker-Funktionen alle 1 und

$$Z = 2^V \sum_{\{k(U)\}} \prod_{\{^*p\}} c_{(1 - \prod U_{^*\ell})/2}(K). \quad (6.18)$$

Wir werden sehen, dass verschiedene Konfigurationen $U : ^*\ell \longrightarrow U_{^*\ell} \in \{-1, 1\}$ zu derselben Konfiguration $k : \ell \longrightarrow k_\ell \in \{0, 1\}$ 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 (6.18). Mit der Beziehung

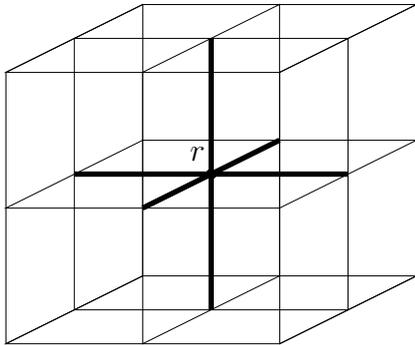
$$c_{k_\ell} = \cosh K e^{k_\ell \log \tanh K} \stackrel{(6.16)}{=} (\cosh K \sinh K)^{1/2} \exp \left(-\frac{1}{2} \log \tan K \prod_{*\ell \in \partial_p \ell} U_{*\ell} \right)$$

ergibt sich folgende Form für die Zustandssumme,

$$Z = 2^V (\cosh K \sinh K)^{3V/2} \cdot \sum_{\{k(U)\}} \exp \left(K^* \sum_{\{*p\}} \prod_{*\ell \in \partial^* p} U_{*\ell} \right) \quad (6.19)$$

Die Summe im Exponenten ist über alle Plaquetten des dualen Gitters und die Beziehung $K^*(K)$ lautet genauso wie in 2-Dimensionen,

$$K^* = -\frac{1}{2} \log \tanh K. \quad (6.20)$$



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 (6.16) 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*

$$U_{\langle rs \rangle} \longrightarrow U'_{\langle rs \rangle} = g_r U_{\langle rs \rangle} g_s^{-1}, \quad g : \Lambda^* \longrightarrow \mathcal{G} = \{-1, 1\} \quad (6.21)$$

sich weder das Feld $k(U)$ noch der Term

$$\prod_{*\ell \in \partial^* p} U_{*\ell}$$

im Exponent in (6.19) ändern. Es sind Beispiele für eichinvariante Größen. Andere wichtige eichinvariante Variablen sind die WILSONschleifen-Variablen: Es sei $*\mathcal{C}$ ein geschlossener Weg (eine Schleife) auf dem dualen Gitter, $\partial^* \mathcal{C} = 0$. Dann ist die Schleifenvariable gegeben

durch

$$W({}^*\mathcal{C}) = \prod_{\ell \in {}^*\mathcal{C}} U_{*\ell} \in \mathcal{G}. \quad (6.22)$$

Zwei Konfigurationen U und U' müssen in der Summe (6.19) identifiziert werden. Die Theorie mit Zustandssumme (6.19) 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 [39]), 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 (6.19) 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

$$\{U_{\langle rs \rangle}\} \sim \{g_r U_{\langle rs \rangle} g_s^{-1}\} \quad (6.23)$$

einen Repräsentanten aus und summiert nur über die Repräsentanten. Oder man summiert einfach über alle U -Konfigurationen in (6.19). 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

$$Z = (\cosh K \sinh K)^{3V/2} \cdot \sum_{\{U\}} \exp \left(K^* \sum_{\{*p\}} \prod_{*\ell \in \partial^* p} U_{*\ell} \right). \quad (6.24)$$

Wir haben benutzt, dass der BOLTZMANNfaktor auf jeder Eichklasse konstant ist. Nun schreiben wir die Eichtransformation (6.21) 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 additive 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 (6.21) für das Eichfeld $A = A_{\langle rs \rangle} \langle rs \rangle$ die uns allen wohlbekannte Form wie in der (diskretisierten) Elektrodynamik,

$$A \longrightarrow A' = A - d\lambda, \quad A \in C_1(\Lambda^*, \mathbb{Z}_2), \quad \lambda \in C_0(\Lambda^*, \mathbb{Z}_2). \quad (6.25)$$

6.3 Peierls Argument

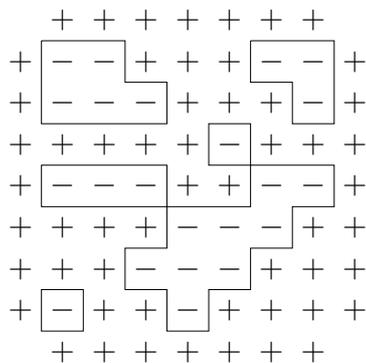
Schon vor der Berechnung der freien Energie des 2-dimensionalen ISING-Modells durch ONSAGER [42] bewies PEIERLS [40] die Existenz zweier Phasen für tiefe Temperaturen. Seine von ihm verwendete Methode ist auf viele andere Modelle der statistischen Physik anwendbar. In diesem Abschnitt wird das PEIERLSche 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* Spinkonfiguration, siehe die folgende Abbildung.

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

$$P[w_\Gamma] = \frac{1}{Z'} \exp \left(-2K \sum_{\gamma_i \in \Gamma_w} |\gamma_i| \right), \quad Z' = \sum_{\Gamma} \exp \left(-2K \sum_{\gamma_i \in \Gamma} |\gamma_i| \right). \quad (6.26)$$

Es gilt die folgende Ungleichung

Lemma (Peierls-Ungleichung) Die Wahrscheinlichkeit für das Auftreten einer Schleife γ kann wie folgt abgeschätzt werden,

$$P[\gamma] \equiv P[\{w : \gamma \in \Gamma_w\}] \leq e^{-2K|\gamma|}. \quad (6.27)$$

Beweis: Die linke Seite ist

$$\begin{aligned} \frac{1}{Z'} \sum_{w:\gamma \in \Gamma_w} \exp\left(-2K \sum_{\gamma' \in \Gamma_w} |\gamma'|\right) &= \frac{1}{Z'} e^{-2K|\gamma|} \sum_{w:\gamma \in \Gamma_w} \exp\left(-2K \sum_{\gamma' \in \Gamma_w \setminus \gamma} |\gamma'|\right) \\ &= \frac{1}{Z'} e^{-2K|\gamma|} \sum_{w:\gamma \in \Gamma_{P_\gamma w}} \exp\left(-2K \sum_{\gamma' \in \Gamma_w} |\gamma'|\right). \end{aligned}$$

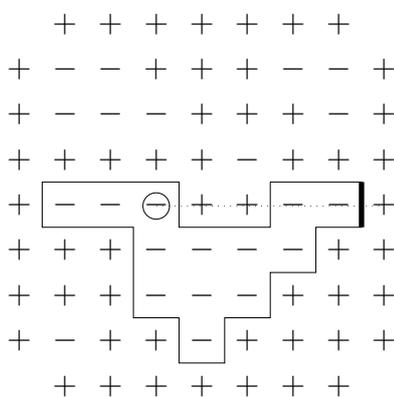
Wir haben benutzt, dass die Schleifen in Γ_w mit $\gamma \in \Gamma_w$ bis auf die Wegnahme von γ identisch zu den Schleifen der Konfiguration $P_\gamma w$ ist, wobei $P_\gamma w$ aus w durch das Umkehren der Vorzeichen aller Spins innerhalb γ hervorgeht. In der letzten Summe wird über eine Teilmenge aller Konfigurationen summiert, so dass sie kleiner oder gleich Z' ist. Dies beweist dann die Ungleichung (6.27). Die Wahrscheinlichkeit für das Auftreten langer Konturen vorgegebener Form sinkt also exponentiell mit deren Länge. Diese Ungleichung ist unabhängig von der Größe des Gitters Λ .

Wir wollen diese Information dazu benutzen, um die Wahrscheinlichkeit der Spinkonfigurationen 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

$$A(n) \leq \frac{n-2}{2} \cdot 3^{n-1}.$$

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

$$\langle s_x \rangle_{P_\beta^+} > 0 \quad \text{und} \quad \langle s_x \rangle_{P_\beta^-} < 0. \quad (6.28)$$

Für tiefe Temperaturen tritt also spontane Magnetisierung auf. Aus der exakten Lösung oder mit Dualitätsargumenten folgt, dass sogar 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:

$$\begin{aligned} P^+[s_x = -1] &\leq \sum_{\gamma \text{ um } x} P[\gamma] \leq \sum_{n \in \mathbb{N}} A(n) e^{-2Kn} = \sum_{m \in \mathbb{N}} A(2m) e^{-4Km} \\ &\leq \sum_{m \in \mathbb{N}} (m-1) 3^{2m-1} e^{-4Km} \leq \frac{1}{3} \sum_{m \in \mathbb{N}} (m-1) e^{-\alpha m} \\ &= \frac{1}{3} e^{-\alpha} \sum_{n \in \mathbb{N}_0} n e^{-n\alpha} = \frac{1}{3} e^{-\alpha} \left(-\frac{\partial}{\partial \alpha} \sum_{n \in \mathbb{N}_0} e^{-n\alpha} \right) = \frac{1}{3} \frac{y^2}{(1-y)^2}, \end{aligned}$$

mit $y = \exp(-\alpha) \in (0, 1)$ 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

$$K > \frac{1}{2} \log 3 - \frac{1}{4} \log(3 - \sqrt{6}) = \frac{1}{4} \log(3(3 + \sqrt{6})) \approx 0.69853. \quad (6.29)$$

eine positive Magnetisierung. Diese Abschätzung ist unabhängig vom Gitterplatz x und der Größe des Gitters Λ . Im thermodynamischen Grenzfall 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 denselben 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 Konfiguration 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

$$\exp\left(\frac{n - 2d}{2d - 2} \log d\right) < A(n) < \frac{n - 2}{2d - 2} (3(2d - 3))^{n-1}. \quad (6.30)$$

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

$$A(n) > d^{k(n)-1} = d^{(n-2)/(2d-2)} = \exp\left(\frac{n-2}{2d-2} \log d\right).$$

Wir beweisen die obere Schranke in (6.30) 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 (6.30).

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.

6.4 Korrelationsungleichungen

Wir betrachten ein Spinmodell auf einem (zunächst) endlichen Gitter Λ mit $V = |\Lambda|$ Gitterpunkten und dem Konfigurationenraum

$$\Omega = \{w = (s_1, \dots, s_V) \mid s_x \in \mathbb{R}\}. \quad (6.31)$$

Jeder Spin kann zunächst alle reellen Werte annehmen. Die Einschränkung von s_x erfolgt durch ein apriori Wahrscheinlichkeitsmass ν_x für s_x , dass *gerade* sei. Zum Beispiel gehört zum ISING-Spin ein mit Gewichten $\frac{1}{2}$ auf den Punkten ± 1 konzentriertes apriori Mass. Wir untersuchen Gittersysteme mit Energie

$$H(w) = - \sum_{K \subset \Lambda} J_K s_K, \quad \text{wobei} \quad s_K = \prod_{x \in K} s_x, \quad J_K \geq 0. \quad (6.32)$$

Der kanonische Erwartungswert einer Spinfunktion $A(w)$ ist

$$\langle A \rangle = \frac{1}{Z} \int_{\mathbb{R}^V} A(w) e^{-\beta H(w)} d\nu(w), \quad d\nu(w) = \prod_{x=1}^V d\nu_x(s_x), \quad (6.33)$$

mit der entsprechenden Zustandssumme Z , so dass $\langle 1 \rangle = 1$ gilt.

Weiter betrachten wir das „doppelte“ System, das aus 2 ungekoppelten Kopien des ursprünglichen Systems besteht:

$$\begin{aligned} \text{Konfigurationen:} & \quad (w, w') \in \mathbb{R}^V \times \mathbb{R}^V \\ \text{a-priori-Mass:} & \quad d\nu(w, w') = d\nu(w) d\nu(w') \\ \text{Energie:} & \quad H(w, w') = H(w) + H(w'). \end{aligned} \quad (6.34)$$

In diesem System benutzt man oft die Variablen

$$u = \frac{1}{\sqrt{2}}(w + w') \quad \text{und} \quad v = \frac{1}{\sqrt{2}}(w - w'). \quad (6.35)$$

Es gilt nun die folgende Ungleichung von GRIFFITHS, KELLY und SHERMAN:

1. GKS-Ungleichung: *Ist die Energiefunktion $H : \Omega \rightarrow \mathbb{R}$ ferromagnetisch, so gilt die Ungleichung*

$$\langle s_A \rangle \geq 0 \quad (6.36)$$

für alle $A \subset \Lambda$, wobei in A derselbe Punkt von Λ mehrfach vorkommen darf.

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,

$$Z \cdot \langle s_A \rangle = \sum_{n_1, \dots, n_V} a_{n_1 \dots n_V} \int s_1^{m_1} \cdots s_V^{m_V} d\nu(s_1) \cdots d\nu(s_V),$$

wobei $m_x = n_x + (\text{Vielfachheit von } x \text{ in } A)$ ist. Da ν_x als gerade vorausgesetzt wurde, ist das letzte Integral

$$\prod_{x=1}^V \int s_x^{m_x} d\nu_x(s_x) = \begin{cases} 0 & \text{für ungerades } m_x \\ \geq 0 & \text{sonst.} \end{cases}$$

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*

$$\langle u_A v_B \rangle \geq 0 \tag{6.37}$$

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 (6.36). Wir müssen daher noch zeigen, dass

$$I_{mn} = \int_{\mathbb{R}^2} u^m v^n d\nu(s) d\nu(s') \geq 0$$

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 $d\nu(s) d\nu(s')$ 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

$$\langle s_A s_B \rangle - \langle s_A \rangle \langle s_B \rangle \geq 0 \quad \forall A, B \subset \Lambda. \quad (6.38)$$

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 (6.37) von GINIBRE folgt dann die Ungleichung (6.38).

Wir betrachten nun anstelle des allgemeinen Modells mit Energie (6.32) den speziellen Fall von Paarwechselwirkungen,

$$H(w) = - \sum_{\langle xy \rangle} J_{xy} s_x s_y - \sum_x J_x s_x \quad (6.39)$$

und setzen zunächst ferromagnetische Kopplungen $J_{xy} \geq 0$ voraus. Dann gilt die

Percus-Ungleichung: *Im doppelten System ist*

$$\langle v_a \rangle \geq 0 \quad \forall A \subset \Lambda. \quad (6.40)$$

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

$$-H(w) - H(w') = \sum_{xy} J_{\langle xy \rangle} (u_x u_x + v_x v_x) - \sqrt{2} \sum_x J_x u_x.$$

Nun entwickelt man nur den Term $\exp(\sum J_{xy} v_x v_y)$ und zeigt, dass

$$I = \sum_{\mathbb{R}^{2V}} d\nu(w) d\nu(w') v_1^{n_1} \cdots v_V^{n_V} \exp \left(\sum_{\langle xy \rangle} J_{xy} u_x u_y + \sqrt{2} \sum_x J_x u_x \right) \geq 0$$

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 [43].

Anwendungen: Besonders wichtig ist die 2. GKS-Ungleichung in der Form

$$\langle s_A s_B \rangle - \langle s_A \rangle \langle s_B \rangle = \frac{\partial \langle s_A \rangle}{\partial J_B} \geq 0. \quad (6.41)$$

Es folgt die Monotonie der Korrelationsfunktionen als Funktionen der Kopplungskonstanten. Insbesondere wächst $\langle s_A \rangle$ monoton

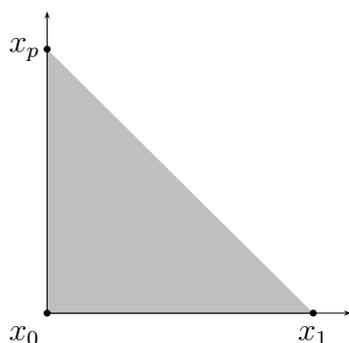
- bei wachsendem äußeren Feld
- bei wachsender ferromagnetischer Kopplung
- bei sinkender Temperatur.

Die Ungleichung (6.41) erlaubt uns, verschiedene Modelle der statistischen Mechanik miteinander zu vergleichen. So folgt aus dem PEIERLSchen Argument für Systeme mit NN-Wechselwirkung dann 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.

6.5 Anhang C: Differenzenkalkül

Bei der Behandlung von allgemeinen Gittertheorien und insbesondere der Dualitäten lohnt es, den Differenzen-Kalkül auf dem Gitter zu kennen. Der Vollständigkeit halber erinnern wir an die Definition und die wesentlichen Eigenschaften von Simplizial-Komplexen in einem EUKLIDischen Raum¹.

¹In dieser Vorlesung benötigen wir nicht die allgemeineren Simplexe in Mannigfaltigkeiten.



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

$$\langle \pi(x_0) \dots \pi(x_p) \rangle = \text{sign}(\pi) \langle x_0 \dots x_p \rangle. \quad (\text{C-1})$$

Der j -Seite eines Simplex ist die Menge definiert durch $\lambda_j = 0$. Sie ist gleich dem x_j gegenüberliegenden Oberflächenstück. Die 2 Seiten des 1-Simplex $\langle x_0 x_1 \rangle$ sind die 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 *Simplizial-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,

$$\phi_p = \sum_{i=1}^{N_p} \varphi_i v_p^i, \quad (\text{C-2})$$

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

$$\begin{aligned}\phi_0 &= \sum_i \varphi_i \langle x_i \rangle \\ \phi_1 &= \frac{1}{2} \sum_{ij} \varphi_{ij} \langle x_i x_j \rangle \\ \phi_2 &= \frac{1}{3!} \sum_{ijk} \varphi_{ijk} \langle x_i x_j x_k \rangle \quad \dots\end{aligned}\tag{C-3}$$

Wegen (C-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,

$$\partial : C_p(\mathcal{G}) \longrightarrow C_{p-1}(\mathcal{G}).\tag{C-4}$$

Für einen orientierte p -Zelle ist

$$\partial v_p^i = \sum_j [v_p^i : v_{p-1}^j] v_{p-1}^j,\tag{C-5}$$

wobei die *Inzidenzmatrix* wie folgt definiert ist:

$$[v_p^i : v_{p-1}^j] = \begin{cases} \pm 1 & \text{falls } v_{p-1}^j \subset v_p^i \\ 0 & \text{sonst.} \end{cases}\tag{C-6}$$

Das Plus- oder Minuszeichen berücksichtigt die relative Orientierung der beiden Zellen.

Für ein p -Simplex ist der Rand gegeben durch

$$\partial \langle x_0 \dots x_p \rangle = \sum_0^p (-)^j \langle x_0 \dots \check{x}_j \dots x_p \rangle \quad (\text{C-7})$$

Die Definition (C-7) für Simplexe impliziert die Definition (C-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,

$$\partial \partial = 0, \quad (\text{C-8})$$

und der Rand eines Randes gleich Null. Es genügt, dies für Simplexe zu beweisen,

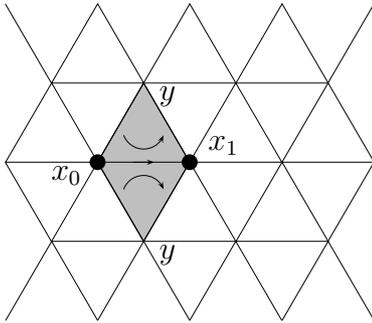
$$\begin{aligned} \partial \partial \langle x_0 x_1 x_2 \dots x_p \rangle &= \partial \left(\sum_j (-)^j \langle x_0 \dots \check{x}_j \dots x_p \rangle \right) \\ &= \sum_{k < j} (-)^{j+k} \langle x_0 \dots \check{x}_k \dots \check{x}_j \dots x_p \rangle \\ &\quad - \sum_{k > j} (-)^{j+k} \langle x_0 \dots \check{x}_j \dots \check{x}_k \dots x_p \rangle = 0. \end{aligned} \quad (\text{C-9})$$

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,

$$dv_p^i = \sum_j [v_{p+1}^j : v_p^i] v_{p+1}^j. \tag{C-10}$$

Hier ist wieder das Vorzeichen wichtig.



Zum Beispiel ist der Co-Rand eines Simplex $\langle x_0 \dots x_p \rangle$ die Kette

$$\sum_{y: \langle yx_0 \dots x_p \rangle} \langle yx_0x_1 \dots x_p \rangle. \tag{C-11}$$

Summiert wird hier über alle y , für die $\langle yx_0 \dots x_p \rangle$ ein $p + 1$ -Simplex ist. Beim Dreiecksgitter ist $d\langle x_0x_1 \rangle$ die Summe von zwei Dreiecken.

Genauso wie der Randoperator ist der *Co-Randoperator* nilpotent,

$$dd = 0. \tag{C-12}$$

Für Standardsimplexe ist der Beweis relativ einfach:

$$dd\langle x_0x_1 \dots x_p \rangle = \sum_{y,y': \langle y'yx_0 \dots x_p \rangle} \langle y'yx_0 \dots x_p \rangle = 0,$$

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

$$d\phi_0 = \sum_x \phi_x \sum_{y: \langle yx \rangle} \langle yx \rangle = \sum_{\langle xy \rangle} (\phi_x - \phi_y) \langle yx \rangle. \tag{C-13}$$

Er ist der *Differenziengradient* von ϕ_0 . Für eine 1-Kette (Vektorfeld) ϕ_1 ist

$$d\phi_1 = \sum_{\langle xy \rangle} \phi_{xy} \sum_{z: \langle zxy \rangle} \langle zxy \rangle = \sum_{\langle xyz \rangle} (\phi_{xy} - \phi_{zy} + \phi_{yz}) \langle zxy \rangle \tag{C-14}$$

Die *Divergenz* einer 1-Kette erhält man mit dem Randoperator. Man findet

$$\partial\phi_1 = \sum_{\langle yx \rangle} \phi_{yx} \partial\langle yx \rangle = \sum_{\langle yx \rangle} \phi_{yx} (\langle x \rangle - \langle y \rangle) = \sum_x \langle x \rangle \sum_{y:\langle yx \rangle} \phi_{xy}. \quad (\text{C-15})$$

Der Koeffizient von $\langle x \rangle$ ist minus der Differenzen-Divergenz am Punkt x . Wir erwarten, dass ∂d proportional zum LAPLACEoperator sein sollte. Für eine 0-Zelle gilt zum Beispiel,

$$\begin{aligned} \partial d\phi_0 &= \delta \left(\sum_x \sum_{y:\langle yx \rangle} \phi_x \langle yx \rangle \right) \\ &= \sum_x \langle x \rangle \left(q\phi_x - \sum_{y:\langle yx \rangle} \phi_y \right) = - \sum_x (\Delta\phi_0)(x) \langle x \rangle, \end{aligned} \quad (\text{C-16})$$

wobei q die Anzahl 1-Simplexe ist, die x als Randpunkt haben. Für einen Zellkomplex ist

$$\partial d\phi_0 = \sum_{jk} \phi_i [v_1^j : v_0^i] [v_1^j : v_0^k] v_0^k. \quad (\text{C-17})$$

Für 0-Ketten aus $C_0(\Lambda, \mathcal{G})$ findet man wieder die Formel (C-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,

$$\mathcal{C} = \langle x_0 x_1 \rangle + \langle x_1 x_2 \rangle + \dots + \langle x_{n-1} x_n \rangle, \quad \langle x_i x_{i+1} \rangle \in K, \quad (\text{C-18})$$

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 Kontinuumstheorie entspricht folgende Formel für eine 1-Kette,

$$(\phi, \mathcal{C}) \equiv \phi(\mathcal{C}) = \sum_{\langle xy \rangle \in \mathcal{C}} \phi_{xy}, \quad (\text{C-19})$$

wobei wir auf der linken Seite das in beiden Argumenten innere Produkt

$$(v_p^i, v_q^j) = \delta^{ij} \delta_{pq} \quad (\text{C-20})$$

einführten. 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

$$(\langle xy \rangle, \langle uv \rangle) = \delta(x, u)\delta(y, v) - \delta(x, v)\delta(y, u). \quad (\text{C-21})$$

Nun betrachten wir $(d\phi, \mathcal{C})$ für ein beliebiges Skalarfeld (1-Kette),

$$(d\phi, \mathcal{C}) = \sum_{i=0}^{n-1} (\phi_{x_{i+1}} - \phi_{x_i}) = \phi_b - \phi_a \quad (\text{C-22})$$

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

$$(d\phi, \mathcal{C}) = (\phi, \partial\mathcal{C}). \quad (\text{C-23})$$

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,

$$\mathcal{S} = \sum_{i \in I} v_2^i, \quad \partial\mathcal{S} = \sum_{i \in I, k} [v_2^i : v_1^k] v_1^k. \quad (\text{C-24})$$

Die Fläche \mathcal{S} braucht keineswegs eben zu sein. Es sei nun

$$\phi = \sum_j \phi_j v_1^j, \quad d\phi = \sum_{jk} \phi_j [v_2^k : v_1^j] v_2^k.$$

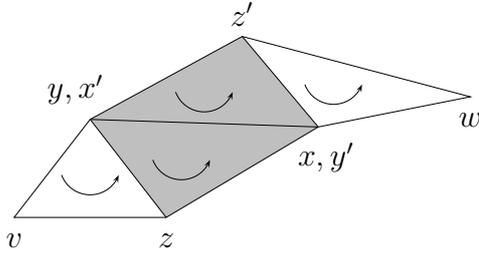
eine beliebige 1-Kette. Dann sind

$$\begin{aligned} (d\phi, \mathcal{S}) &= \sum_{i \in I} \sum_{j, k} \phi_j ([v_2^k : v_1^j] v_2^k, v_2^i) = \sum_{i \in I, j} \phi_j [v_2^i : v_1^j] \\ (\phi, \partial\mathcal{S}) &= \sum_j \sum_{i \in I, k} \phi_j (v_1^j, [v_2^i : v_1^k] v_1^k) = \sum_{i \in I, j} \phi_j [v_2^i : v_1^j] \end{aligned}$$

offensichtlich gleich und es folgt der STOKESSche Satz

$$(d\phi, \mathcal{S}) = (\phi, \partial\mathcal{S}). \quad (\text{C-25})$$

In der folgenden Abbildung ist der Satz für ein Simplicialkomplex illustriert.



Im Beitrag der beiden schraffierten Dreiecke zu $(d\phi, \mathcal{S})$ heben sich ϕ_{xy} und $\phi_{x'y'} = -\phi_{xy}$ 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 $\partial\mathcal{S}$ übrig.

Ist $\mathcal{S} = P$ 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

$$(dv_p^i, v_{p+1}^j) = (v_p^i, \partial v_{p+1}^j) \tag{C-26}$$

gilt. In der Tat, mit Hilfe von (C-10) und (C-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 (C-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

$$(d\phi_p, \chi_{p+1}) = (\phi_p, \partial\chi_{p+1}). \tag{C-27}$$

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

$$V = \sum_{i \in V} v_d^i \longrightarrow V^* = \sum_{i \in V} {}^*v_0^i. \tag{C-28}$$

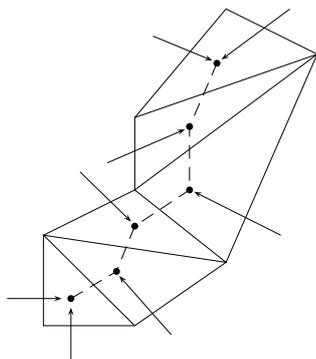
Mit $i \in V$ meinen wir, dass die d -dimensionale Zelle v_d^i in V liegt. Der Co-Rand des dualen Volumens ist

$$dV^* = \sum_j \sum_{i \in V} [{}^*v_1^j : {}^*v_0^i] {}^*v_1^j,$$

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

$$(\phi_1^*, dV^*) = (\partial \phi_1^*, V^*) \tag{C-29}$$

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 $C^*(\Lambda^*, \mathcal{G})$:

$$\begin{aligned} v_p^i &\longleftrightarrow {}^*v_{d-p}^i \\ [v_p^i : v_{p-1}^j] &\longleftrightarrow [{}^*v_{d-p+1}^j : {}^*v_{d-p}^i]. \end{aligned} \quad (\text{C-30})$$

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,

$$\phi_p = \sum_i \phi_i v_p^i \longrightarrow {}^*\phi_p = \sum_i \phi_i {}^*v_{d-p}^i. \quad (\text{C-31})$$

Mit dem entsprechenden inneren Produkt für die dualen Ketten,

$$({}^*v_p^i, {}^*v_q^j) = \delta^{ij} \delta_{pq} \quad (\text{C-32})$$

ist die Dualitätstransformation „längenerhaltend“,

$$(\phi_p, \chi_q) = ({}^*\phi_{d-p}, {}^*\chi_{d-q}), \quad (\text{C-33})$$

Daraus folgen sofort die wichtige Formeln

$${}^*d^* = \partial \quad \text{und} \quad {}^*\partial^* = d. \quad (\text{C-34})$$

Der Randoperator geht in den Co-Randoperator über und umgekehrt,

$$\begin{aligned} \partial \phi_p &= \sum_{ij} \phi_i [v_p^i : v_{p-1}^j] v_{p-1}^j \xleftrightarrow{*} \sum_{ij} \phi_i [{}^*v_{d-p+1}^j : {}^*v_{d-p}^i] {}^*v_{d-p+1}^j = d^* \phi_{d-p} \\ d \phi_p &= \sum_{ij} \phi_{ij} [v_{p+1}^j : v_p^i] v_{p+1}^j \xleftrightarrow{*} \sum_{ij} \phi_i [{}^*v_{d-p}^i : {}^*v_{d-p-1}^j] {}^*v_{d-p-1}^j = \partial^* \phi_{d-p}. \end{aligned}$$

und (C-27) geht über in

$$(\partial^* \phi_p, {}^*\chi_{p-1}) = ({}^*\phi_p, d^* \chi_{p-1}) \quad (\text{C-35})$$

Das Divergenztheorem (C-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,

$$\int_{\sigma_p} \omega = \frac{1}{p!} \int_{v_p} \omega_{i_1 \dots i_p} \frac{\partial(x^{i_1} \dots x^{i_p})}{\partial(t^1 \dots t^p)} dt^1 \dots dt^p = \int_{v_p} f^*(\omega). \quad (\text{C-36})$$

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

$$\int_{c_p} \omega = \sum \phi_i \int_{\sigma_p^i} \omega \quad (\text{C-37})$$

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*

$$\int_{c_p} d\omega^{p-1} = \int_{\partial c_p} \omega^{p-1}. \quad (\text{C-38})$$

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

$$\int_{\sigma_2} d\omega^1 \stackrel{(\text{C-9})}{=} \int_{\langle x_1 x_2 \rangle} \omega^1 - \int_{\langle x_0 x_2 \rangle} \omega^1 + \int_{\langle x_0 x_1 \rangle} \omega^1.$$

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

$$\int_{\partial c_{p+1}} \omega^p = \int_{c_{p+1}} d\omega^p = 0. \quad (\text{C-39})$$

Die Menge aller *geschlossenen p -Formen* bezeichnen wir mit \dot{F} . Unterscheiden sich zwei Ketten nur um einen Rand, $c_p - c'_p = \partial c_{p+1}$, dann gilt für jede geschlossene p -Form

$$\int_{c_p} \omega^p = \int_{c'_p} \omega^p, \quad \omega^p \in \dot{F}^p(M), \quad c_p - c'_p \in \partial C_{p+1}. \quad (\text{C-40})$$

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

$$\int_{c_p} \omega^p = \int_{c_p} d\alpha^{p-1} = \int_{\partial c_p} \alpha^{p-1} = 0. \quad (\text{C-41})$$

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

$$\int_{c_p} \omega^p = \int_{c_p} \omega'^p, \quad c_p \in \dot{C}_p, \quad \omega^p - \omega'^p \in dF^{p-1}. \quad (\text{C-42})$$

Zusammengefasst können wir folgendes sagen: ist ω^p eine geschlossene p -Form und c_p ein Zyklus, dann gilt

$$\int_{c_p} \omega^p = \int_{c_p + \partial c_{p+1}} (\omega^p + d\omega^{p-1}). \quad (\text{C-43})$$

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 RHAMschen Gruppen,

$$\begin{aligned} H_p(M) &= \dot{C}_p(M) / \partial C_{p+1}(M) \\ R^p(M) &= \dot{F}^p(M) / dF^{p-1}(M). \end{aligned} \quad (\text{C-44})$$

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

$$\begin{array}{ccccccccccc} C_d & \xrightarrow{\partial} & C_{d-1} & \xrightarrow{\partial} & \dots & \xrightarrow{\partial} & C_2 & \xrightarrow{\partial} & C_1 & \xrightarrow{\partial} & C_0 & \xrightarrow{\partial} & 0 \\ F^0 & \xrightarrow{d} & F^1 & \xrightarrow{d} & \dots & \xrightarrow{d} & F^{d-2} & \xrightarrow{d} & F^{d-1} & \xrightarrow{d} & F^d & \xrightarrow{d} & 0. \end{array} \quad (\text{C-45})$$

Dies sind *exakte Sequenzen* wenn das Bild von ∂ (d) genau dem Kern von ∂ (d) ist. Ist die erste Sequenz in (C-45) exakt, so sind alle Homologiegruppen trivial, ist die zweite Sequenz exakt, dann sind alle DERHAMschen Gruppen trivial.

Kapitel 7

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 [45] sowie KADANOV, FISHER [44] und WILSON [46] in der Statistischen Physik und Quantenfeldtheorie. Ich verweise auf die Darstellungen

in den empfehlenswerten Büchern [47] für eine eingehende Darstellung der Methode.

7.1 Ising-Modelle

Für die ISING-Kette 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.

7.1.1 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. Im Ausdruck für die Zustandssumme summieren wir über jeden zweiten Spin ($b = 2$), d.h. über die Spins auf den geraden Gitterpunkten, und erhalten

$$\begin{aligned} Z(N, K, h) &= \sum_{s_1, s_2, \dots} e^{K s_1 s_2 + \frac{1}{2} h (s_1 + s_2)} e^{K s_2 s_3 + \frac{1}{2} h (s_2 + s_3)} \times \dots \\ &= \sum_{s_1, s_2, \dots} e^{K (s_1 s_2 + s_2 s_3) + \frac{1}{2} h (s_1 + 2s_2 + s_3)} \times \dots \\ &= \sum_{s_1, s_3, \dots} \left(e^{(K + \frac{1}{2} h)(s_1 + s_3) + h} + e^{-(K - \frac{1}{2} h)(s_1 + s_3) - h} \right) \dots \end{aligned} \quad (7.1)$$

Wir wollen annehmen, dass N gerade ist. 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

$$e^{(K + \frac{1}{2} h)(s_1 + s_3) + h} + e^{-(K - \frac{1}{2} h)(s_1 + s_3) - h} = e^{2g(K, h)} e^{K' s_1 s_3 + \frac{1}{2} h' (s_1 + s_3)}. \quad (7.2)$$

Wir werden die neuen Kopplungen und g weiter unten berechnen. Diese Ersetzung machen wir nun für jeden Faktor in (7.1). Es ergibt sich wieder die Zustandssumme einer ISING-

Kette auf dem ausgedünnten Gitter mit Kopplungen K', h' ,

$$\begin{aligned} Z(N, K, h) &= e^{Ng} \sum_{s_1, s_3, \dots} e^{K's_1 s_3 + \frac{1}{2}h'(s_1 + s_3)} e^{K's_3 s_5 + \frac{1}{2}h'(s_3 + s_5)} \times \dots \\ &= e^{Ng} Z\left(\frac{N}{2}, K', h'\right). \end{aligned} \quad (7.3)$$

Wir fassen dieses bemerkenswerte Resultat zusammen: auf dem verdünnten Gitter mit doppeltem Gitterabstand finden wir die gleiche funktionale Form für die Energie,

$$\beta H \longrightarrow \beta H' - g(K, h)N, \quad -\beta H' = K' \sum_{\langle x'y' \rangle} s_{x'} s_{y'} + h' \sum_{x'} s_{x'}, \quad (7.4)$$

wobei x' und y' ungerade Gitterpunkte sind. Die soeben vorgenommene „Ausintegration“ von Freiheitsgraden nennt man *Dezimierungsprozedur*. Weiter unten werden wir noch andere Dezimierungsprozeduren besprechen. Im Allgemeinen brauchen die Freiheitsgrade auf dem verdünnten Gitter nicht mehr mit einem Teil der ursprünglichen Freiheitsgrade identisch zu sein.

Um die neuen Konstanten zu berechnen, werten wir die Gleichung (7.2) für drei Werte der beiden Spins (s_1, s_3) aus. Man findet folgende drei unabhängigen Gleichungen:

$$\begin{aligned} (s_1, s_3) = (1, 1) : & \quad 2e^h \cosh(2K + h) = e^{2g} e^{K'+h'} \\ (s_1, s_3) = (-1, -1) : & \quad 2e^{-h} \cosh(2K - h) = e^{2g} e^{K'-h'} \\ (s_1, s_3) = (1, -1) : & \quad 2 \cosh(h) = e^{2g} e^{-K'}. \end{aligned}$$

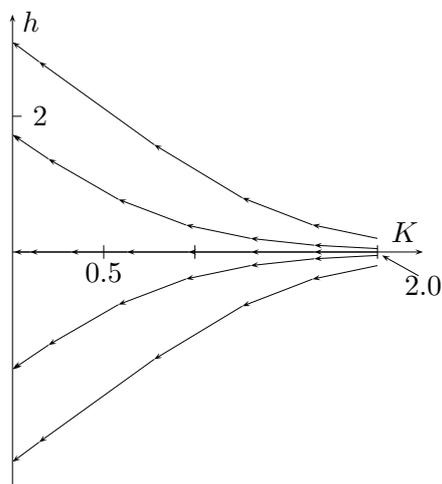
Aufgelöst nach den drei Funktionen $K'(K, h)$, $h'(K, h)$ und $g(K, h)$ ergibt sich

$$\begin{aligned} K \xrightarrow{R_2} K' &= \frac{1}{4} \log \frac{\cosh(2K + h) \cosh(2K - h)}{\cosh^2 h} \\ h \xrightarrow{R_2} h' &= h + \frac{1}{2} \log \frac{\cosh(2K + h)}{\cosh(2K - h)} \\ g(K, h) &= \frac{1}{8} \log (16 \cosh(2K + h) \cosh(2K - h) \cosh^2 h). \end{aligned} \quad (7.5)$$

Die folgenden Abbildung zeigt Trajektorien der Kopplungskonstanten in der (K, h) -Ebene bei mehrfacher Anwendung der Transformation (7.5). 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 Dezimation 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;
}
```

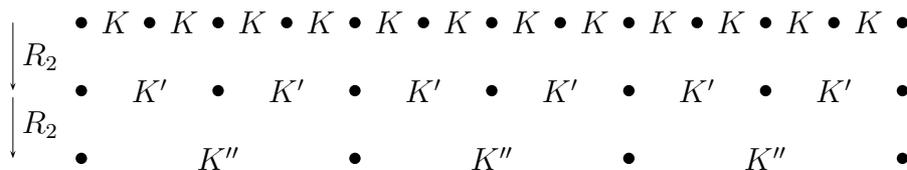
Die ISING-Kette geht in sich über, allerdings mit renormierten Kopplungen (K', h') und doppeltem Abstand zwischen nächsten Nachbarn. Verdünnen wir das System nochmals,

$$R_2 \circ R_2 = R_4, \tag{7.6}$$

dann wird der Abstand zwischen nächsten Nachbarn das Vierfache des Abstands im ursprünglichen System und die Kopplungskonstanten (K', h') gehen über in die Konstanten (K'', h'') . Diese Verdünnungsprozedur kann wieder und wieder ausgeführt werden. Ist b der Skalenfaktor, um den das System ausgedünnt wird (für die Transformation 7.1 ist $b = 2$) und R_b die entsprechende Transformation, dann ist

$$R_b \circ R_b = R_{b^2}. \tag{7.7}$$

Es gibt allerdings keine inverse Transformation R_b^{-1} , da die Ausintegration von Freiheitsgraden nicht rückgängig gemacht werden kann. Die Transformationen R_b bilden also nur eine Halbgruppe und keine Gruppe (da das Inverse fehlt). Die Transformation R_b nennt man nach WILSON *Renormierungsgruppentransformation* (RG-Transformation).



Nach zweimaliger Anwendung der Gleichung (7.3) folgt nun unmittelbar, dass

$$Z(N, K, h) = e^{Ng(K,h)} e^{\frac{1}{2}Ng(K',h')} Z\left(\frac{N}{4}, K'', h''\right) \quad (7.8)$$

gilt. Setzen wir die Iteration fort, so ergibt sich folgende Formel für die freie Energiedichte der ISING-Kette,

$$f(K, h) = -\frac{1}{\beta} \left(g(K, h) + \frac{1}{2}g(K', h') + \frac{1}{2^2}g(K'', h'') + \frac{1}{2^3}g(K''', h''') + \dots \right). \quad (7.9)$$

In jeder Stufe der Iteration ist die Form der Funktion g gleich, da die renormierte Energie (7.4) immer die gleiche Form hat.

Für ein System mit Magnetfeld Null hat das ausgedünnte System ebenfalls Magnetfeld Null. Die Gerade $h = 0$ ist 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 vom ausgedünnten System geerbt wird. Die Abbildung R_2 kann also kein \mathbb{Z}_2 -brechendes Magnetfeld erzeugen. Um die Gleichungen etwas zu vereinfachen, schalten wir nun das Magnetfeld ab und betrachten den Renormierungsgruppenfluss für $h = 0$:

$$K' = R_2(K) = \frac{1}{2} \log \cosh(2K) \quad \text{und} \quad g = \frac{1}{4} \log (4 \cosh(2K)). \quad (7.10)$$

Nur wenn die Kopplungskonstante K einer der beiden Werte 0 oder ∞ annimmt, bleibt sie inert bei einer Transformation. Die beiden Punkte $K = 0, \infty$ sind also *Fixpunkte* der RG-Transformation R_2 . Der Punkt $K = 0$ heisst Hochtemperatur-Fixpunkt und der Punkt $K = \infty$ Tieftemperatur-Fixpunkt.

Bei der Transformation R_2 verdoppelt sich der Abstand zwischen nächsten Nachbarn. Die Korrelation zwischen zwei Spins auf dem verdünnten Gitter ist nach Konstruktion auf dem feineren oder größeren 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

$$\langle s_x s_y \rangle \sim e^{-|x-y|/\xi}, \quad |x-y| \gg \xi, \quad (7.11)$$

und wir schliessen, dass bei jeder Transformation R_2 die Korrelationslänge halbiert wird,

$$\xi' = \frac{\xi}{2}. \tag{7.12}$$

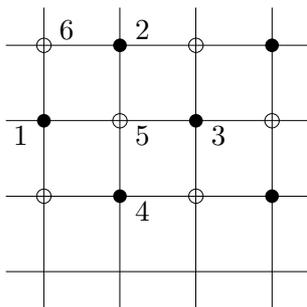
Bei der Lösung des $1d$ ISING-Modells haben wir gezeigt, dass die Korrelationslänge am Tieftemperatur-Fixpunkt divergiert und am Hochtemperatur-Fixpunkt verschwindet. Der Tieftemperatur-Fixpunkt ist ein kritischer Punkt des Systems und am Hochtemperatur-Fixpunkt verschwindet die Wechselwirkung. Die Trajektorien der Renormierungsgruppe enden im trivialen Fixpunktes mit $\xi = 0$. Die Kopplungskonstante K und die Korrelationslänge ξ werden bei jedem Renormierungsschritt verringert.

7.1.2 Das zweidimensionale Modell

Wir betrachten als weiteres, weniger einfaches Beispiel das zweidimensionale feldfreie ISING-Modell mit

$$\beta H = -K \sum_{\langle xy \rangle} s_x s_y. \tag{7.13}$$

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

$$\begin{aligned} & \sum_{s_5 = \pm 1} e^{K s_5 (s_1 + s_2 + s_3 + s_4)} \\ &= e^{K(s_1 + s_2 + s_3 + s_4)} + e^{-K(s_1 + s_2 + s_3 + s_4)}. \end{aligned}$$

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

$$\begin{aligned} K'_1 &= 2K'_2 = \frac{1}{4} \log \cosh(4K) \\ K'_3 &= \frac{1}{8} \log \cosh(4K) - \frac{1}{2} \log \cosh(2K) \\ g &= \frac{1}{16} (\log \cosh(4K) + \log \cosh(2K) + 8 \log 2). \end{aligned} \quad (7.14)$$

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,

$$Z(V, K) = Z' \left(\frac{V}{2}, K' \right) = \sum_{w'} e^{-(\beta H)'(w')} \quad (7.15)$$

mit der LANDAU-GINZBURG-WILSON (LGW) Energiefunktion

$$-(\beta H)' = Vg + K'_1 \sum_{\text{NN}} s_x s_y + K'_2 \sum_{\text{üNN}} s_x s_y + K'_3 \sum_{\text{Q}} s_x s_y s_u s_v, \quad (7.16)$$

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,

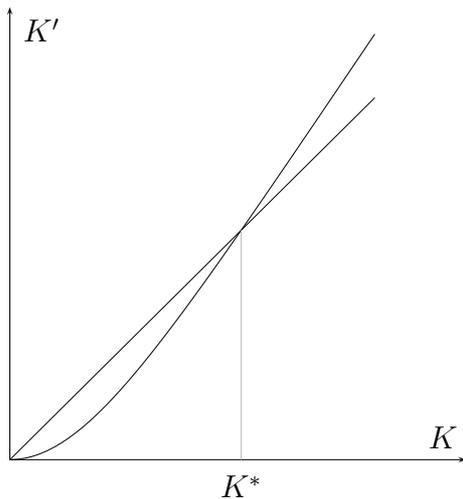
$$Z(V, K) = e^{Vg} \sum_{w'} \exp \left(K' \sum_{\text{NN}} s_{x'} s_{y'} \right), \quad K' = K'_1 + K'_2. \quad (7.17)$$

Die Transformation

$$K \longrightarrow K'(K) = \frac{3}{8} \log \cosh 4K \quad (7.18)$$

hat Fixpunkte bei $0, \infty$ und bei

$$K^* = 0.50698. \quad (7.19)$$



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 [44] und [45] 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 Eigenschaften des physikalischen Systems aus welcher Information der RG folgen.

7.2 Fixpunkte

Wir wenden uns nun der allgemeineren Diskussion der RG-Methoden zu. Wir betrachten ein d -dimensionales Gittersystem mit Kopplungskonstanten

$$K = \{K_A | A \subset \Lambda\} = (K_1, K_2, \dots), \quad (7.20)$$

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

$$H(w) = - \sum_{A \subset \Lambda} K_A s_A, \quad (7.21)$$

soll der renormierte Energie bis auf eine extensive additive Konstante $-Vg(K)$ die gleiche funktionale Form haben,

$$H(w) \longrightarrow H'(w') - Vg(K), \quad H'(w') = - \sum_{A \subset \Lambda'} K'_A S_A \quad (7.22)$$

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

$$\sum_{\langle xy \rangle} K_{xy} s_x s_y \longrightarrow \sum_{\langle x'y' \rangle} K'_{x'y'} S_{x'} S_{y'}. \quad (7.23)$$

Der konstante Beitrag $Vg(K)$ in (7.22) 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

$$K'_i = R_i(K_1, K_2, \dots). \quad (7.24)$$

Dabei bleibt die Zustandssumme unverändert,

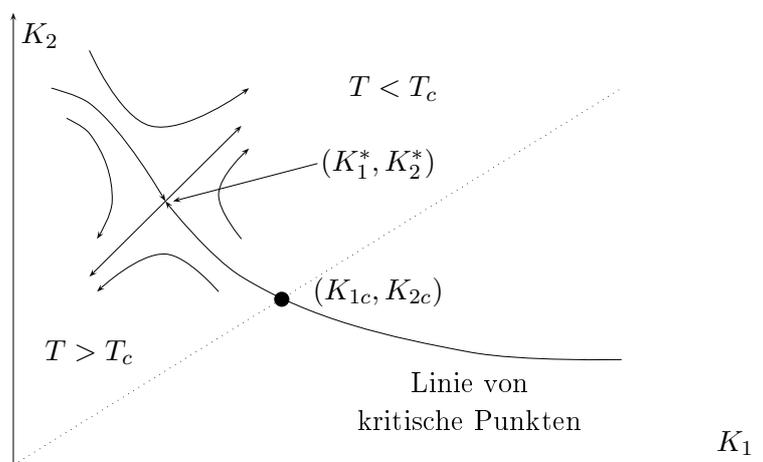
$$e^{-F(V,K)} = \sum_{w \in \Omega} e^{-H(w)} = e^{Vg(K)} \sum_{w' \in \Omega'} e^{-H'(w')} = e^{Vg(K) - F(V',K')}. \quad (7.25)$$

Wir wollen wieder annehmen, dass der thermodynamische Grenzfall $V \rightarrow \infty$ existiert. Für die freien Energiedichten der beiden Systeme im thermodynamischen Grenzfall ergibt sich dann folgende Rekursionsrelation

$$f(K) = b^{-d} f(K') - g(K) \quad (7.26)$$

die uns schon einmal im eindimensionalen ISING-Modell in (7.4) begegnete.

Wir argumentierten bereits, dass *Fixpunkte* der Rekursionsrelation entweder zu kritischen Systemen mit $\xi = \infty$ 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 kritischen 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:

- RG-Trajektorien können 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 kann 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 einer RG-Transformation,

$$K^* = R(K^*). \quad (7.27)$$

Wir betrachten nun den Renormierungsfluss 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

$$\delta K'_i = \sum_j M_{ij} \delta K_j, \quad M_{ij} = \left. \frac{\partial R_i}{\partial K_j} \right|_{K^*}. \quad (7.28)$$

Nun suchen wir die Links-Eigenvektoren und entsprechenden Eigenwerte der linearisierten Abbildung,

$$\sum_j \Phi_{\alpha j} M_{ji} = \lambda_\alpha \Phi_{\alpha i} = b^{y_\alpha} \Phi_{\alpha i}. \quad (7.29)$$

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

$$g_\alpha = \sum_i \Phi_{\alpha i} \delta K_i. \quad (7.30)$$

Es sind die Projektionen von δK auf die Eigenvektoren Φ_α . Es gilt

$$g'_\alpha = \sum_i \Phi_{\alpha i} \delta K'_i = \sum_{ij} \Phi_{\alpha i} M_{ij} \delta K_j = \sum_j b^{y_\alpha} \Phi_{\alpha j} \delta K_j = b^{y_\alpha} g_\alpha. \quad (7.31)$$

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 (7.26) 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

$$f_s(K) = b^{-d} f_s(K'). \quad (7.32)$$

In der Nähe des Fixpunktes linearisieren wir und erhalten folgendes Skalenverhalten für die freie Energiedichte,

$$f_s(K^* + \delta K) = b^{-d} f_s(K^* + \delta K'). \quad (7.33)$$

Im Folgenden schreiben wir nicht immer das Argument K^* und setzen

$$f_s(K^* + \delta K) \equiv f_s(g_1, g_2, \dots), \quad \delta K \stackrel{(7.30)}{=} \delta K(g).$$

Nach ℓ -maliger Iteration der RG-Transformation finden wir

$$f_s(g_1, g_2, \dots) = b^{-d\ell} f_s(b^{\ell y_1} g_1, b^{\ell y_2} g_2, \dots). \quad (7.34)$$

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

$$t = \frac{T - T_c}{T_c} \equiv g_1 \quad \text{und} \quad \beta h = g_2. \quad (7.35)$$

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 (7.21),

$$H = - \sum_{A \subset \Lambda} K_A s_A \equiv - \sum K_i O_i. \quad (7.36)$$

In der Nähe des Fixpunktes kann sie entwickelt werden, $H = H^* + \delta H$, mit

$$H^* = - \sum K_i^* O_i \quad \text{und} \quad \delta H = - \sum \delta K_i O_i = - \sum_{\alpha} g_{\alpha} Q_{\alpha}. \quad (7.37)$$

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.

7.2.1 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

$$b^{y_1 \ell} = \frac{1}{t}, \quad \text{d.h.} \quad b^\ell = t^{-1/y_1} \quad (7.38)$$

ist. Wir folgern, dass

$$f_s(K^* + \delta K) \equiv f_s(t, h, g_3, \dots) = t^{d/y_1} f_s \left(1, \frac{h}{t^{y_2/y_1}}, \frac{g_3}{t^{y_3/y_1}}, \dots \right) \quad (7.39)$$

gelten muss. Ganz analog schliesst man auf die Beziehung

$$f_s(t, h, g_3, \dots) = h^{d/y_2} f_s \left(\frac{t}{h^{y_1/y_2}}, 1, \frac{g_3}{h^{y_3/y_2}}, \dots \right). \quad (7.40)$$

Man beachte, dass in der Nähe des Fixpunktes die letzten Argumente der freien Energie auf den rechten Seiten gegen Null streben,

$$\frac{g_i}{t^{y_i/y_1}} \xrightarrow{t \rightarrow 0} 0 \quad \text{und} \quad \frac{g_i}{h^{y_i/y_2}} \xrightarrow{h \rightarrow 0} 0, \quad i = 3, 4, \dots \quad (7.41)$$

Durch mehrmaliges Ableiten nach den relevanten Kopplungen t und h erhält man den Zusammenhang zwischen kritischen Exponenten und den Eigenwerten der linearisierten RG-Transformation (7.28).

Wir erinnern an die wichtigsten thermodynamischen Größen aus dem dritten Kapitel:

$$\text{Magnetisierung:} \quad m(t, h) = \langle s_x \rangle = -\frac{\partial f}{\partial h} \quad (7.42)$$

$$\text{Suszeptibilität:} \quad \chi(t, h) = \beta \sum_x \langle s_0 s_x \rangle_c = -\frac{\partial^2 f}{\partial h^2} \quad (7.43)$$

$$\text{innere Energiedichte:} \quad u(t, h) = \lim_{\Lambda \rightarrow \mathbb{Z}^d} \frac{1}{V} \langle H \rangle = \frac{\partial(\beta f)}{\partial \beta} \quad (7.44)$$

$$\text{spezifische Wärme:} \quad c(t, h) = \frac{\partial u}{\partial T} = -\beta^2 \frac{\partial u}{\partial \beta}. \quad (7.45)$$

Diese im Bereich der makroskopischen Thermodynamik definierbaren Größen haben folgende kritische Exponenten:

$$c(t, 0) \sim E_\pm |t|^{-\alpha}, \quad m(t, 0) \sim B t^\beta \quad (7.46)$$

$$\chi(t, 0) \sim A_\pm |t|^{-\gamma}, \quad \chi(0, h) \sim |h|^{-1/\delta} \text{sign}(h). \quad (7.47)$$

Daneben gibt es noch zwei weitere kritische Exponenten η und ν , die mit der Korrelationslänge und Zweipunktsfunktion verknüpft sind,

$$\text{Korrelationslänge: } \xi^{-1} = - \lim_{|x| \rightarrow \infty} \frac{1}{|x|} \log \langle s_0 s_x \rangle_c \sim |t|^\nu \quad (7.48)$$

$$\text{Greensfunktion: } \langle s_0 s_x \rangle \sim \frac{1}{|x|^{d-2+\eta}} \quad (7.49)$$

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 [48]:

	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 (7.39,7.40) 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

$$f_s \sim |t|^{2-\alpha}. \quad (7.50)$$

Der Vergleich mit (7.39) 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

$$\begin{aligned} 2 - \alpha &= \frac{d}{y_1}, & \beta &= \frac{d - y_2}{y_1} \\ \gamma &= \frac{2y_2 - d}{y_1}, & \frac{1}{\delta} &= \frac{d - y_2}{y_2} \end{aligned} \quad (7.51)$$

$$\nu = \frac{1}{y_1} \quad , \quad d - 2 + \eta = 2(d - y_2)$$

Damit haben wir die *Skalenrelationen* $\alpha, \beta, \gamma, \delta, \nu, \eta \longleftrightarrow y_1, y_2$ gefunden. Die Exponenten 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*,

$$\begin{aligned} \gamma &= \nu(2 - \eta) && \text{(Fisher)} \\ \alpha + 2\beta + \gamma &= 2 && \text{(Rushbrooke)} \\ \gamma &= \beta(\delta - 1) && \text{(Widom)} \\ \nu d &= 2 - \alpha && \text{(Josephson, 'Hyperskalen-Relation').} \end{aligned} \tag{7.52}$$

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

(7.53)

Wir bemerken, dass die Skalenrelationen für alle aufgelisteten Modelle erfüllt sind, bis auf die Molekularfeldapproximation. Wir schliessen daraus, dass die MFA zur Beschreibung des kritischen Verhaltens für $d < 4$ Dimensionen ungeeignet ist.

Man beachte die *Universalität* des kritischen Verhaltens: kritische Exponenten hängen nicht von den vielen 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.

7.3 Blockspintransformation

Die Monte-Carlo-Renormierungsgruppenmethoden (MCRG-Methoden) wurden von MA, SWENDSEN und anderen entwickelt [49]. Für 2-dimensionale ISINGartige Modelle auf dem quadratischen Gitter mit Energiefunktion

$$\beta H = - \sum_{A \subset \Lambda} K_A s_A, \quad K_A = \beta J_A, \quad s_A = \prod_{x \in A} s_x, \quad (7.54)$$

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 Punkte des

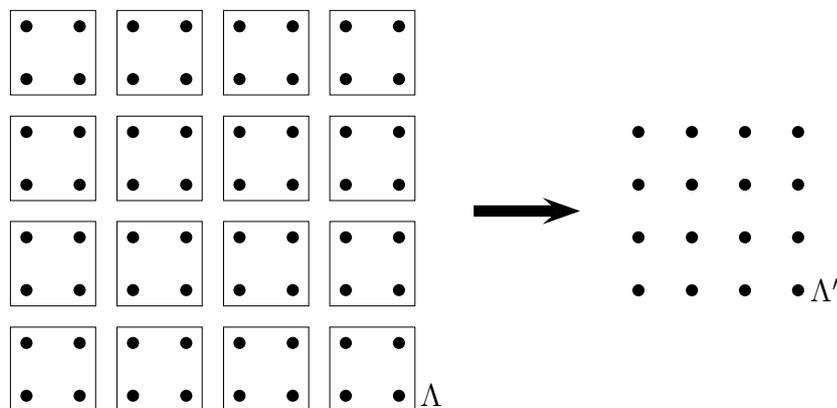


Abbildung 7.1: Jeweils vier Spins werden zu einem Blockspin zusammengefasst.

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

$$w' = \sum_{w \in \Omega} T(w', w) \quad (7.55)$$

bestimmt. $T(w', w)$ ist die Wahrscheinlichkeit dafür, dass der Konfiguration w die Blockspinkonfiguration w' zugeordnet wird. Der Kern sollte folgende Bedingungen erfüllen,

$$0 \leq T(w', w) \leq 1 \quad \text{und} \quad \sum_{w'} T(w', w) = 1. \quad (7.56)$$

Beim Übergang vom feinen zum groben Gitter definieren wir die Energie für die Blockspins wie folgt,

$$e^{-H'(w')} = \sum_{w \in \Omega} T(w', w) e^{-H(w)} \quad (7.57)$$

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

$$H'(w') = \sum_{A' \subset \Lambda'} K_{A'} S_{A'} \quad (7.58)$$

geschrieben werden kann. Unser Ziel ist es, eine Rekursionrelation für die Kopplungskonstanten K zu finden.

Die erste Bedingung in (7.56) sorgt dafür, dass die rechte Seite in (7.57) niemals negativ wird und deshalb als Exponent einer reellen Funktion der w' geschrieben werden kann. Wegen der zweiten Bedingung in (7.56) ändert sich die Zustandssumme bei dieser Transformation nicht,

$$Z'_{H'} = \sum_{w' \in \Omega'} e^{-H'(w')} = \sum_{w' \in \Omega'} \sum_{w \in \Omega} T(w', w) e^{-H(w)} = \sum_{w \in \Omega} e^{-H(w)} = Z_H. \quad (7.59)$$

Wir erinnern daran, dass die verbundenen Korrelationsfunktionen der s_A durch Ableiten von $\log Z$ nach den entsprechenden Kopplungen gewonnen werden können. Zum Beispiel die Einpunkt- und verbundenen Zweipunktfunktionen,

$$\langle s_A \rangle = \frac{\partial \log Z}{\partial K_A}$$

$$\langle s_a; s_B \rangle \equiv \langle s_A s_B \rangle - \langle s_A \rangle \langle s_B \rangle = \frac{\partial \langle s_A \rangle}{\partial K_B}. \quad (7.60)$$

Die Korrelationsfunktionen des geblockten Systems können im ursprünglichen oder im geblockten System berechnet werden,

$$\langle S_{A'} \rangle' \equiv \frac{\sum_{w'} S_{A'} e^{-H'(w')}}{\sum_{w'} e^{-H'(w')}} \quad (7.61)$$

$$= \frac{\sum_{w'} S_{A'} \sum_w T(w', w) e^{-H(w)}}{\sum_w e^{-H(w)}} \quad (7.62)$$

Bei Kenntnis der geblockten Energiefunktion H' könnten wir Erwartungswerte von Funktionen der geblockten Spins gemäß (7.61) berechnen. Ist nur die Energiefunktion H des ursprünglichen Systems und der Blockkern T bekannt, so kann man sie mit Hilfe der Formel (7.62) 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

$$\begin{aligned} T_{A'B} &= \frac{\partial \langle S_{A'} \rangle'}{\partial K_B} = \frac{\partial}{\partial K_B} \frac{\sum_{w'} S_{A'} \sum_w T(w', w) e^{-H(w)}}{\sum_{w'} \sum_w T(w', w) e^{-H(w)}} \\ &= \frac{\sum_w \{ \sum_{w'} S_{A'} T(w', w) \} s_B e^{-H(w)}}{\sum_w e^{-H(w)}} - \langle S_{A'} \rangle' \langle s_B \rangle. \end{aligned}$$

Also gilt

$$T_{A'B} = \left\langle \left(\sum_{w'} S_{A'} T(w', w) \right) s_B \right\rangle - \langle S_{A'} \rangle \langle s_B \rangle. \quad (7.63)$$

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

$$T_{A'B} = \frac{\partial \langle S_{A'} \rangle'}{\partial K_B} = \sum_{C'} \frac{\partial \langle S_{A'} \rangle'}{\partial K_{C'}} \frac{\partial K_{C'}}{\partial K_B} = \sum_{C'} \langle S_{A'}; S_{C'} \rangle \frac{\partial K_{C'}}{\partial K_B}. \quad (7.64)$$

Die verbundenen Korrelationsfunktionen auf der rechten Seite können nun ebenfalls mit Hilfe einer Simulation bestimmt werden. Mit $T_{A'B}$ aus (7.63) 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 7.1 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

$$T(w', w) = \prod_{x' \in \Lambda'} t\left(S_{x'}, \sum_{x \in x'} s_x\right), \quad (7.65)$$

mit

$$\begin{aligned} \sum s_x > 0 &\implies S_{x'} = 1 && \text{mit Wahrscheinlichkeit } 1 \\ \sum s_x < 0 &\implies S_{x'} = -1 && \text{mit Wahrscheinlichkeit } 1 \\ \sum s_x = 0 &\implies \begin{cases} S_{x'} = 1 & \text{mit Wahrscheinlichkeit } 1/2 \\ S_{x'} = -1 & \text{mit Wahrscheinlichkeit } 1/2 \end{cases} \end{aligned} \quad (7.66)$$

Wir berechnen nun die Renormierung der Kopplungskonstanten für das $2d$ -ISING-Modell ohne Magnetfeld auf dem 4×4 Gitter. Im Gegensatz zum eindimensionalen Fall können wir nicht mehr erwarten, dass H' die gleich funktionale Form wie H hat. In Raumdimensionen $d > 1$ treffen wir auf die Komplikation, dass die RG-Prozedur selbst für ein einfaches Modell mit nächsten-Nachbarn-Wechselwirkungen längerreichweitige Wechselwirkungen und Mehr-Spin-Wechselwirkungen erzeugt. Auf dem einfachen 2×2 Gitter gibt es nur 3 unterschiedliche Wechselwirkungsterme: die Wechselwirkung zwischen nächsten Nachbarn, zwischen übernächsten Nachbarn und die Wechselwirkung aller 4 Spins,

$$\begin{aligned} H' = & - K_1 \sum_{x'} S_{x'} (S_{x'+(1,0)} + S_{x'+(0,1)}) \\ & - K_2 \sum_{x'} S_{x'} (S_{x'+(1,1)} + S_{x'+(1,-1)}) \\ & - K_3 \sum_{x'} S_{x'} S_{x'+(1,0)} S_{x'+(0,1)} S_{x'+(1,1)} \\ & - K_4 \sum_{x'} 1. \end{aligned} \quad (7.67)$$

Wir haben absichtlich überzählt, da auf größeren Gittern zum Beispiel die beiden Terme in der zweiten Zeile nicht mehr identisch sind. Alle $2^{16} = 65536$ Konfigurationen des 4×4 -Gitters Λ können auf dem Computer leicht erzeugt werden. Die Definition (7.57) gestattet dann eine direkte Berechnung der geblockten Energie H' .

Auf dem 2×2 -Gitter Λ' gibt es nur $2^4 = 16$ Konfigurationen und davon haben nur 4

Klassen verschiedene BOLTZMANN-Gewichte:

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.

```
/* 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++){
            /* Binaerdastellun 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]*k11[p];
                kc2[p]=bs[p]*k12[p];
                kc3[p]=bs[p]*k13[p];
                kc4[p]=bs[p]*k14[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 gebl. Gitters */
short x,y,xm,yp,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 $bs[VB]$.

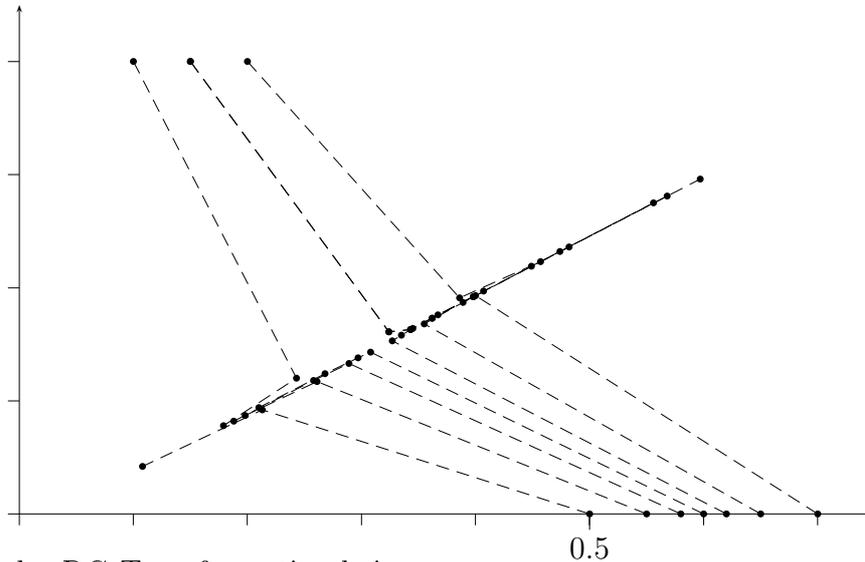
```

/* 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];
    };
}

```

Die folgende Figur¹ zeigt die Projektion der RG-Flusses auf die K_1, K_2 -Ebene. 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.

¹Programm muss noch verbessert werden!



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

$$T_{ab} = \left. \frac{\partial K'_a}{\partial K_b} \right|_{K^*}. \quad (7.68)$$

Die Berechnung des entsprechenden Differenzenquotienten bei Annäherung des Fixpunktes ergibt

$$T = \begin{pmatrix} 1.3590 & 1.5560 & 0.6020 \\ 0.4342 & 0.7490 & 0.1947 \\ -0.0045 & -0.0099 & 0.1314 \end{pmatrix}. \quad (7.69)$$

Um die kritischen Exponenten zu finden, müssen wir diese nicht-symmetrische Matrix

²<http://linde.physik.hu-berlin.de/~hasenbus/vorlesung.htm>

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

$$\frac{1}{\nu} = y_1 \approx 0.947, \quad y_2 \approx -2.483, \quad y_3 \approx -2.917. \quad (7.70)$$

Wir erinnern an das exakte Resultat $1/\nu = 1$ und die Vorhersage der MF-Näherung, $\nu_{MFA} = 0.5$. Wir haben einen relevanten RG-Exponenten gefunden. Dies stimmt mit dem exakten Resultat (für $h = 0$) überein.

Kapitel 8

Skalarfelder

Skalarfeldtheorien sind die einfachsten wechselwirkenden Feldtheorien und werden deshalb bevorzugt bei einer Einführung in die Quantenfeldtheorie behandelt. Noch wichtiger als ihr pädagogische Wert ist ihr Auftreten als Bestandteil des Standardmodells der elektroschwachen Theorie. Das HIGGS-Teilchen wird darin als 4-komponentiges Skalarfeld beschrieben, das mit den anderen Feldern und sich selbst wechselwirkt. Wenn wir (in Gedanken) die Wechselwirkung mit den anderen Feldern abschalten, dann erhalten wir eine 4-komponentige selbst-wechselwirkende ϕ^4 -Theorie.

Wir wissen, dass diese Subtheorie des Standardmodells (der HIGGS-Sektor) inkonsistent ist. Eine ϕ^4 -Theorie in 4 oder mehr Dimensionen ist trivial. Die Skalarfelder sind vermutlich auch dafür verantwortlich, dass die elektroschwache Eichtheorie nur als effektive Theorie unterhalb eines cut-offs Λ sinnvoll ist¹. Da die elektroschwache Theorie nicht asymptotisch frei ist, müsste es für diese noch einen weiteren nicht-GAUSSschen Fixpunkt geben. Danach wurde im Rahmen von Gittertheorien bisher erfolglos gesucht.

Sollte das Standardmodell – 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 PLANCK-Masse? Die Antwort auf diese Frage hängt vom Wert der Masse des HIGGS-Teilchens ab. Auch deshalb ist die Suche nach dem HIGGS-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 Defekten 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.

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

8.1 Quantisierung des Skalarfelds

Ich gehe davon aus, dass sie mit den wesentlichen Tatsachen über Feldtheorien, wie sie zum Beispiel in den Vorlesungen Quantenmechanik II und/oder Quantenfeldtheorie I besprochen werden, vertraut sind. Wir betrachten in diesem Kapitel ein reelles Skalarfeld,

$$\phi : \mathbb{R}^d \longrightarrow \mathbb{R}, \quad x = (x^\mu) = (ct, \mathbf{x}) \in \mathbb{R}^d, \quad \phi(x) \in \mathbb{R}, \quad (8.1)$$

das die KLEIN-GORDON-Gleichung $(\square + m^2)\phi = 0$ erfüllt. Ein einfacher heuristischer Übergang von der Quantenmechanik zur Quantenfeldtheorie geht über die Ersetzung

$$q^i(t) \longrightarrow \phi(t, \mathbf{x}) = \phi(x), \quad \sum_i \longrightarrow \int d^{d-1}x. \quad (8.2)$$

Formal können wir viele Resultate aus Kapitel zwei übernehmen, wenn wir diese Ersetzungen vornehmen. So hat zum Beispiel der Vakuum-Erwartungswert zeitgeordneter Produkte von Feldoperatoren die Funktionalintegral-Darstellung,

$$\langle 0 | T \hat{\phi}(x_1) \cdots \hat{\phi}(x_n) | 0 \rangle = \frac{1}{Z} \int \mathcal{D}\phi \phi(x_1) \cdots \phi(x_n) e^{iS[\phi]/\hbar}, \quad (8.3)$$

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 Quantenmechanik ist eine spezielle eindimensionale Feldtheorie, in der man über alle Funktionen $q : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$, also über alle 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,

$$\hat{\phi}_E(x) \equiv \hat{\phi}_E(\mathbf{x}, \tau) = e^{\tau H} \hat{\phi}(0, \mathbf{x}) e^{-\tau H}, \quad x = (\mathbf{x}, \tau) = (\mathbf{x}, -ix^0), \quad (8.4)$$

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

$$\begin{aligned} \langle T \hat{\phi}_E(x_1) \cdots \hat{\phi}_E(x_n) \rangle_\beta &= \frac{1}{Z(\beta)} \text{tr} e^{-\beta H} T \hat{\phi}_E(x_1) \cdots \hat{\phi}_E(x_n) \\ &= \frac{1}{Z(\beta)} \int \mathcal{D}\phi \phi(x_1) \cdots \phi(x_n) e^{-S_E[\phi]/\hbar} \end{aligned} \quad (8.5)$$

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

$$\phi : \mathbb{R}^{d-1} \times [0, \beta] \longrightarrow \mathbb{R}, \quad \phi(\mathbf{x}, \tau + \beta) = \phi(\mathbf{x}, \tau), \quad (8.6)$$

funktional integriert. Hier tritt die EUKLIDSche Wirkung S_E auf. Der Normierungsfaktor in (8.5) ist die *Zustandssumme*

$$Z(\beta) = e^{-\beta F} = \int \mathcal{D}\phi e^{-S_E[\phi]/\hbar}. \quad (8.7)$$

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,

$$\begin{aligned} S^{(n)}(x_1, \dots, x_n) &= \langle 0 | T \hat{\phi}_E(x_1) \cdots \hat{\phi}_E(x_n) | 0 \rangle \\ &= \frac{1}{Z} \int \mathcal{D}\phi \phi(x_1) \cdots \phi(x_n) e^{-S_E[\phi]/\hbar}. \end{aligned} \quad (8.8)$$

Diese sind invariant unter EUKLIDSchen LORENTZ-Transformationen, ändern also nicht bei $SO(d)$ -Drehungen der Argumente x_i . Unter teilweise natürlichen Annahmen an die SCHWINGER-Funktionen kann man aus ihnen die vollständige Quantentheorie im MIN-KOWSKI-Raum rekonstruieren. Die Vakuumerwartungswerte der zeitgeordneten Produkte von Feldoperatoren 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 EUKLIDSche Theorien untersuchen werden.

Das freie Skalarfeld hat die EUKLIDSche Wirkung

$$S_0(\phi) = \frac{1}{2} \int d^d x (\nabla\phi \cdot \nabla\phi + m^2\phi^2) \quad (8.9)$$

und die Funktionalintegrale in (8.8) werden zu berechenbaren GAUSSSchen Integralen. Die Addition eines Potentialterms führt auf die EUKLIDSche Wirkung des wechselwirkenden Feldes,

$$S_E = S_0 + \int d^d x V(\phi). \quad (8.10)$$

Entwickelt man die Funktionalintegrale (8.5) oder (8.8) in Potenzen der Wechselwirkung V , dann erhält man die mit Divergenzen behaftete Störungsentwicklung in Form von

FEYNMAN-Graphen. Der Propagator wird durch S_0 bestimmt und die Vertizes durch die Selbstwechselwirkung V .

8.1.1 Das freie Feld bei endlichen Temperaturen

Für das freie Feld mit EUKLIDScher Wirkung

$$S_0(\phi) = \frac{1}{2}(\phi, A\phi), \quad A = -\Delta + m^2, \quad (8.11)$$

wobei (\cdot, \cdot) das L_2 -Skalarprodukt bezeichnet, führt die funktionale Integration für die Zustandssumme (8.7) auf die Determinante des Operators A , und entsprechend ist

$$F(\beta) = \frac{1}{2\beta} \log \det A \quad (8.12)$$

Der Operator wirkt auf β -periodische Funktionen und diese Randbedingung an die Moden bedingt die Temperaturabhängigkeit der freien 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. Sei also A ein positiver Operator mit reinem Punktspektrum $\{\lambda_n\}$. Durch „beranden“ des untersuchten Quantensystems können wir erreichen, dass die auftretenden Differentialoperatoren diskretes Spektrum haben. Die zu A gehörige ζ -Funktion ist definiert durch die Reihe,

$$\zeta_A(s) = \sum_n \lambda_n^{-s}, \quad (8.13)$$

die für elliptische Differentialoperatoren und genügend grosse $\Re(s)$ konvergiert. Die Reihe definiert die ζ -Funktion in einer Halbebene der komplexen s -Ebene. Über eine analytische Fortsetzung gewinnt man die Funktion auf der gesamten komplexen s -Ebene [50].

Zum Beispiel konvergiert die Reihe (8.13) für den einfachen Operator in (8.11) für alle s mit $\Re(s) > d/2$ und definiert eine meromorphe Funktion in der komplexen s -Ebene. Hier ist wichtig, dass in der Umgebung von $s = 0$ die ζ -Funktion analytisch ist. Die für Matrizen gültige Identität

$$\log \det A = \text{Sp} \log A = \sum \log \lambda_n = -\left. \frac{\zeta_A(s)}{ds} \right|_{s=0} \quad (8.14)$$

wird 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 Renor-

mierungsschemen ist bekannt.

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

$$\zeta_A(s) = \sum_n \frac{1}{\Gamma(s)} \int_0^\infty dt t^{s-1} e^{-t\lambda_n} = \frac{1}{\Gamma(s)} \int_0^\infty dt t^{s-1} \text{Sp} (e^{-tA}). \quad (8.15)$$

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

$$\text{Sp} (e^{-tA}) = \int dx K(t; x, x), \quad t > 0. \quad (8.16)$$

und die ζ -Funktionen hat die Darstellung

$$\zeta_A(s) = \frac{1}{\Gamma(s)} \int_0^\infty dt t^{s-1} \int dx K(t; x, x). \quad (8.17)$$

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

$$\frac{\partial}{\partial t} K(t; x, y) = -A_x K(t; x, y) \quad \text{und} \quad \lim_{t \rightarrow 0} K(t; x, y) = \delta(x - y). \quad (8.18)$$

Damit können wir die Determinante von A scheinbar wie folgt berechnen: wir konstruieren die eindeutige Lösung des Anfangswertproblems (8.18), setzen die Lösung $K(t, x, y)$ in die Darstellung (8.16) für die ζ -Funktion ein und berechnen dann die Determinante mit Hilfe der Formel (8.14). Diese Vorgehensweise hat mindestens zwei Probleme. Für viele Operatoren von Interesse kann man K nicht explizit berechnen und zudem existiert die Integraldarstellung (8.17) 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 [50, 51].

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

$$K(t; x, x') = \frac{e^{-m^2 t}}{(4\pi t)^{d/2}} \sum_{n \in \mathbb{Z}} e^{-\{(\tau - \tau' + n\beta)^2 + (\mathbf{x} - \mathbf{x}')^2\}/4t} \quad (8.19)$$

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

der Endpunkte des Intervalls $[0, \beta]$. Wir finden

$$\zeta_A(s) = \frac{\beta V}{(4\pi)^{d/2} \Gamma(s)} \int dt t^{s-1-d/2} e^{-m^2 t} \sum_{n=-\infty}^{\infty} e^{-n^2 \beta^2 / 4t}. \quad (8.20)$$

Eigentlich ist das Spektrum von $-\Delta + m^2$ auf $S^1 \times R^{d-1}$ 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 würde für die hier betrachtete freie Theorie zu identischen Resultaten führen.

Mit Hilfe der Formel

$$\int_0^\infty dt t^a e^{-bt-c/t} = 2 \left(\frac{c}{b}\right)^{(a+1)/2} K_{a+1} \left(2\sqrt{bc}\right) \quad (8.21)$$

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

$$\zeta_A(s) = \frac{\beta V}{(4\pi)^{d/2}} \frac{m^{d-2s}}{\Gamma(s)} \left(\Gamma\left(s - \frac{d}{2}\right) + 4 \sum_1^\infty \left(\frac{nm\beta}{2}\right)^{s-d/2} K_{d/2-s}(nm\beta) \right) \quad (8.22)$$

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

$$f(\beta) = -\frac{1}{2\beta V} \zeta'_A(0) = -\frac{m^4}{128\pi^2} \left(3 - 2 \log m^2 + 64 \sum_{n=1,2,\dots} \frac{K_2(nm\beta)}{(nm\beta)^2} \right). \quad (8.23)$$

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

$$\lim_{m \rightarrow 0} f(\beta) = -\frac{T^4}{\pi^2} \zeta_R(4), \quad (8.24)$$

wobei die in der Zahlentheorie so wichtige Zetafunktion von RIEMANN auftritt,

$$\zeta_R(x) = \sum_{n \in \mathbb{N}} n^{-x} \quad (8.25)$$

Die weiter unten benötigten Werte dieser Funktion und ihrer Ableitung sind

$$\xi_R(0) = -\frac{1}{2}, \quad \xi_R(2) = \frac{\pi^2}{6}, \quad \xi_R(4) = \frac{\pi^4}{90} \quad \text{und} \quad \zeta'_R(0) = -\frac{1}{2} \log(2\pi). \quad (8.26)$$

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 Teilchen ohne Spin

$$f(\beta) = -\frac{\pi^2 T^4}{90} \quad \text{und} \quad u(\beta) = \partial_\beta(\beta f) = \frac{\pi^2 T^4}{30}. \quad (8.27)$$

Für die Hohlraumstrahlung müsste man mit dem Faktor 2 multiplizieren, da Photonen zwei Polarisationsfreiheitsgrade haben.

Um die freie Energie für ein freies Gas von massiven Teilchen zu berechnen, entwickeln wir die BESSEL-Funktion für kleine Argumente,

$$K_{2-s}(x) \sim \frac{2}{x^2} + \frac{1}{8} \left(\frac{3}{4} - \gamma - \log \frac{x}{2} \right) + O(x^4) \quad (8.28)$$

und benutzen die Formel

$$\sum \log(nm\beta) = \log(m\beta)\zeta_R(0) - \zeta'_R(0) \quad (8.29)$$

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

$$f(\beta) = -\frac{1}{128\pi^2} \left(128\zeta_R(4) T^4 - 32\zeta_R(2) m^2 T^2 - 8m^4 \zeta_R(0) \log \frac{m}{2T} \right. \\ \left. + \{3 + 8\zeta'_R(0) + (6 - 8\gamma)\zeta_R(0) - 2 \log m^2\} m^4 \right) + O\left(\frac{m^2}{T^2}\right), \quad (8.30)$$

mit EULER-Konstanten $\gamma \approx 0,5772$. Die Werte für die RIEMANNsche ζ -Funktion sind in (8.26) notiert.

8.2 Effektive Potentiale

Effektive Potentiale sind nützlich bei der Untersuchung der Phasen und Phasenübergänge von Systemen mit Ordnungsparameter. In der Feldtheorie ist das konventionelle effektive Potential die LEGENDRE-Transformierte der SCHWINGER-Funktion bei Anwesenheit einer homogenen Quelle, in der statistischen Mechanik ist es die freie Energie bei festgehaltenem Ordnungsparameter. Es gibt aber alternative Definitionen von effektiven Potentialen.

8.2.1 Konventionelles effektives Potential

In Anwesenheit einer homogenen äusseren Quelle j hat die Zustandssumme

$$Z(j) = \text{Sp} e^{-\beta(\hat{H}-j\hat{\phi})} \equiv e^{\beta V W(\beta,j)} \quad (8.31)$$

die formale Pfadintegral-Darstellung [24]

$$e^{\beta V W(\beta,j)} = c \cdot \int \mathcal{D}\phi \exp \left(-S_E[\phi] + j \int_0^\beta \phi(x) \right), \quad (8.32)$$

wobei in der Quantenstatistik über β -periodische Funktionen zu integrieren ist,

$$\phi(\tau + \beta, \mathbf{x}) = \phi(\tau, \mathbf{x}), \quad \beta = \frac{1}{T}, \quad (8.33)$$

und V das *räumliche Volumen* bezeichnet. Eine konstante Quelle ist verträglich mit der Translationsinvarianz des Systems. $W(\beta, j)$ ist bis auf ein Vorzeichen die freie Energiedichte für das System mit verschobenen HAMILTON-Operator $\hat{H} - j\hat{\phi}$. Deshalb strebt die SCHWINGER-Funktion für tiefe Temperaturen gegen die negative Grundzustandsenergiedichte $W(\beta \rightarrow \infty) = -E_0(j)/V$ dieses Systems. Das konventionelle effektive Potential erhält man über eine LEGENDRE-Transformation aus der SCHWINGER-Funktion,

$$\Gamma(\beta, \varphi) = (\mathcal{L}W)(\varphi) = \sup_j (j\varphi - W(\beta, j)). \quad (8.34)$$

Die maximierende Quelle j heisst zu φ konjugiert. Im Gegensatz zum mikroskopischen Feld ϕ ist φ ein makroskopisches mittleres Feld.

Ist man ganz allgemein an der Vakuumstruktur einer EUKLIDischen Skalarfeldtheorie mit LAGRANGEDichte

$$\mathcal{L}(\phi(x)) = \int d^d x \left\{ \frac{1}{2} \nabla \phi(x) \nabla \phi(x) + V(\phi(x)) \right\}, \quad (8.35)$$

interessiert, dann wird die EUKLIDische Raumzeit Ω im Allgemeinen kein Zylinder $S^1 \times \mathbb{R}^{d-1}$ sein, wie in der Quantenstatistik. Wir wollen deshalb allgemeinere Gebiete $\Omega \subset \mathbb{R}^d$ zur Quantisierung zulassen. Das ϕ -Feld kann auch mehrere Komponenten haben und nicht-trivial unter einer globalen inneren Symmetriegruppe G transformieren. Das klassische Vakuum minimiert die klassische Wirkung und ist durch das V minimierende *homogene* Feld gegeben. Sein Wert ist nicht notwendigerweise gleich dem Vakuumerwartungswert $\langle \hat{\phi} \rangle$ des Quantenfeldes. Um die Quantenkorrekturen zum klassischen Vakuum zu studieren setzt man effektive Potentiale ein. Wie in der Quantenmechanik beginnen wir mit der

Zustandssumme in der Gegenwart einer homogenen äusseren Quelle j

$$Z(\Omega, j) = \int \mathcal{D}\phi \exp \left(-S[\phi] + j \int_{\Omega} \phi(x) \right) = e^{\Omega W(\Omega, j)}. \quad (8.36)$$

Wir benutzen das gleiche Symbol Ω für das Quantisierungsgebiet und sein Volumen. Wählen wir als Raumzeit einen Kasten mit Volumen βV und fordern periodische Randbedingungen, dann ist (8.36) die thermische Zustandssumme (8.32) auf dem Torus. Die SCHWINGER-Funktion $W(\Omega, j)$ ist strikt konvex, da ihre zweite Ableitung gleich dem Erwartungswert der positive Größe $(M - \langle M \rangle)^2$ ist, wobei

$$M = \frac{1}{\Omega} \int \phi(x) d^d x \quad (8.37)$$

das „raum-zeitlich“ gemittelte Feld ist. Die Erwartungswerte hängen von der Quelle j ab, da sie mit der Wirkung (8.35) berechnet werden. Aus $W(j)$ kann man den quantentheoretischen Mittelwert des Feldes berechnen,

$$\langle \phi(x) \rangle_j = \frac{\int \mathcal{D}\phi \phi(x) e^{-S[\phi] + j \int \phi}}{\int \mathcal{D}\phi e^{-S[\phi] + j \int \phi}} = \frac{dW}{dj}. \quad (8.38)$$

An Stellen wo W nicht differenzierbar ist, darf man diese Formel nur mit Vorsicht anwenden. Wir werden darauf zurückkommen.

Das sogenannte *konventionelle effektive Potential* $\Gamma(\Omega, \varphi)$ ist wie in (8.34) die LEGENDRE-Transformierte von $W(\Omega, j)$. Ist das Minimum φ_0 des effektiven Potentials in nicht entartet, so definiert es den eindeutigen Erwartungswert des Feldoperators im Grundzustand. Die semiklassische Entwicklung um φ_0 erzeugt die Einteilchen-irreduziblen FEYNMAN-Graphen [54]. Bei einer spontanen Brechung einer Symmetrie mit Ordnungsparameter φ ist die naive semiklassische Entwicklung für $\Gamma(\varphi)$ ungültig. Sie führt auf ein nicht-konvexes und sogar komplexes Γ und muss modifiziert werden [53].

Weiter unten werden wir zwei weitere effektive Potentiale kennenlernen und deren Beziehung zum konventionellen Potential (8.34) herausarbeiten. Zur Vorbereitung ist es nützlich, vorher eine auf LEGENDRE zurückgehende Transformation zu besprechen.

8.2.2 Die Legendre-Transformation

Die LEGENDRE-Transformation spielt eine wichtige Rolle in der klassischen Mechanik, Thermodynamik und Quantenfeldtheorie, und es lohnt sich, ihre wichtigsten Eigenschaften zu 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 interpolierende Feld

$$\varphi_\alpha = (1 - \alpha)\varphi_1 + \alpha\varphi_2, \quad 0 \leq \alpha \leq 1 \quad (8.39)$$

zwischen φ_1 und φ_2 . Es gilt die Abschätzung

$$\begin{aligned} \Gamma(\varphi_\alpha) &= \sup_j \left\{ (1 - \alpha)(j, \varphi_1) + \alpha(j, \varphi_2) - ((1 - \alpha) + \alpha)W(j) \right\} \\ &\leq (1 - \alpha) \sup_j \{ (j, \varphi_1) - W(j) \} + \alpha \sup_j \{ (j, \varphi_2) - W(j) \} \\ &= (1 - \alpha)\Gamma(\varphi_1) + \alpha\Gamma(\varphi_2), \end{aligned} \quad (8.40)$$

wobei wir benutzen, dass das Supremum einer Summe kleiner oder gleich der Summe der Suprema der Summanden ist. Damit liegt der Graph von Γ unterhalb der die Punkte $(\varphi_i, \Gamma(\varphi_i))$ verbindenden Strecke. Dies beweist die Konvexität von Γ .

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

$$(\varphi_0, j) - W(j) \leq (\varphi_0, j_0) - W(j_0).$$

Das Supremum der linken Seite bezüglich j ist das effektive Potential, so dass

$$\Gamma(\varphi_0) \leq (\varphi_0, j_0) - W(j_0). \quad (8.41)$$

Schreiben wir dies in der Form

$$W(j_0) \leq (\varphi_0, j_0) - \Gamma(\varphi_0). \quad (8.42)$$

und bemerken, dass die rechte Seite kleiner gleich der LEGENDRE-Transformierten von Γ ist, dann folgt

$$W(j_0) \leq (\mathcal{L}^2 W)(j_0). \quad (8.43)$$

Deshalb ist die zweifache LEGENDRE-Transformierte immer größer oder gleich der

ursprünglichen Funktion ist. Andererseits gilt

$$\Gamma(\varphi) \geq (\varphi, j) - W(j) \quad \text{für alle } \varphi \implies W(j) \geq (\varphi, j) - \Gamma(\varphi). \quad (8.44)$$

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

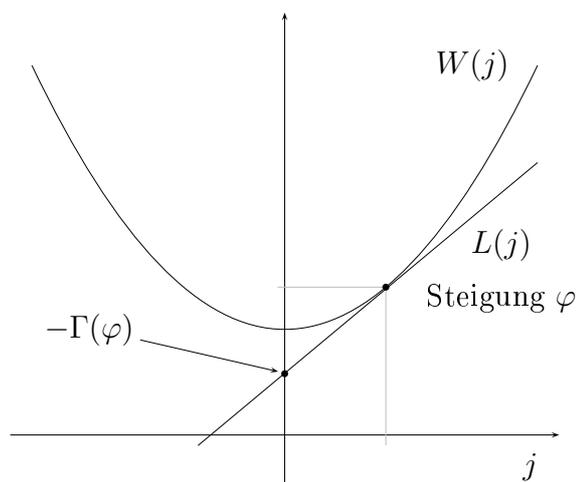
$$(\mathcal{L}^2 W)(j) = W(j). \quad (8.45)$$

3. Für beliebige φ und j gilt die Ungleichung von FENCHEL und YOUNG

$$W(j) + \Gamma(\varphi) \geq (j, \varphi). \quad (8.46)$$

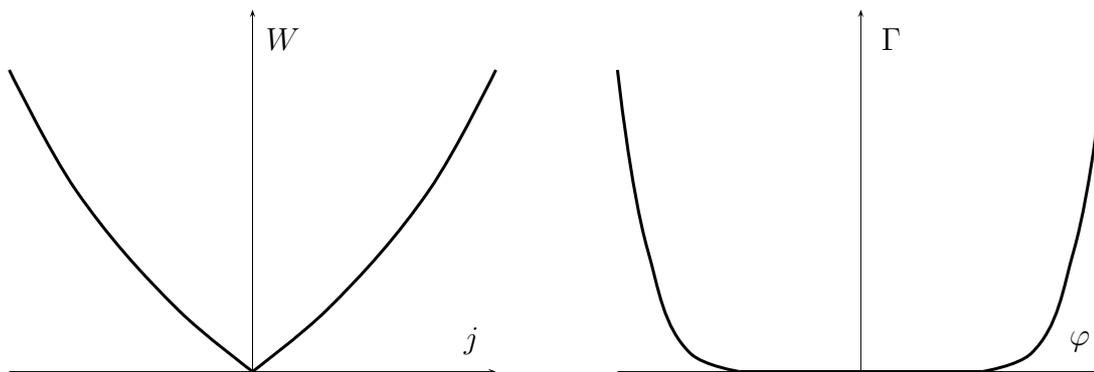
Sie wird zu einer Gleichung für konjugierte Variablen φ und j . Diese Eigenschaft folgt unmittelbar aus der Ungleichung (8.44).

4. Ist die stetige SCHWINGER-Funktion nicht differenzierbar und hat einen Knick, dann hat $\Gamma = \mathcal{L}W$ ein Plateau. Für ein einkomponentiges Feld ist die Breite des Plateau gleich dem Sprung von W' . Umgekehrt wird ein Plateau in einen Knick abgebildet.



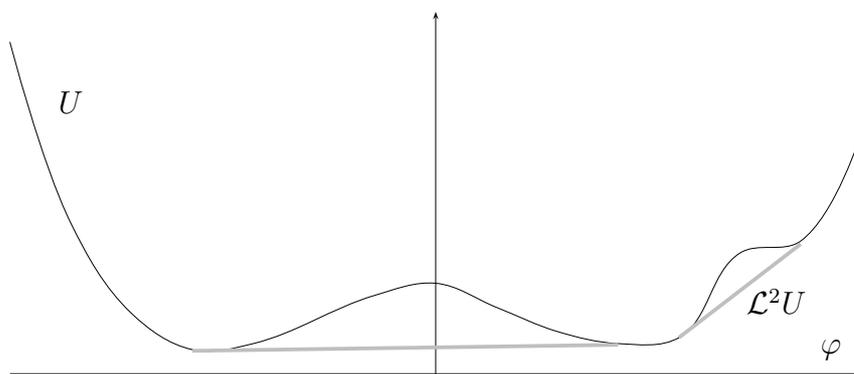
Diese Eigenschaft folgt aus der graphischen Konstruktion der Transformation: $\Gamma(\varphi)$ ist $-L(0)$, wobei der Graph der linearen Funktion $L(j)$ mit Steigung φ denjenigen von $W(j)$ berührt. Für gegebenes φ und eine konvexe und differenzierbare SCHWINGER-Funktion ist der konjugierte Strom durch die Forderung definiert, dass $L(j)$ beim konjugierten Strom tangential an $W(j)$ ist.

In der folgenden Abbildung ist eine typische Situation für ein System mit spontaner Symmetriebrechung skizziert. Die SCHWINGER-Funktion hat einen Knick bei ausgeschalteter Quelle und entsprechend das effektive Potential Γ 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 Γ sind die konjugierten Variablen φ und j wie folgt verbunden,

$$\varphi = W'(j) \quad \text{und} \quad j = \Gamma'(\varphi). \quad (8.47)$$

Ersetzen wir (j, φ) durch (p, \dot{x}) und (W, Γ) durch (H, L) , dann ist dies die bekannte LEGENDRE-Transformation der klassischen Mechanik von der HAMILTONSchen zur LAGRANGESchen Formulierung.

7. Ist Γ die LEGENDRE-Transformierte von W , dann ist Γ_α die LEGENDRE-Transformierte von W_α . Dabei ist $F_\alpha(x)$ die reskalierte Funktion

$$F_\alpha(x) = \alpha F\left(\frac{x}{\alpha^{1/2}}\right). \quad (8.48)$$

Die LEGENDRE-Transformierte des Monoms mit Exponenten $\alpha > 1$ ist das Monom

mit dualem Exponent β ,

$$W(j) = \frac{1}{\alpha} |j|^\alpha \iff \Gamma(\varphi) = \frac{1}{\beta} |\varphi|^\beta, \quad \text{mit } \frac{1}{\alpha} + \frac{1}{\beta} = 1. \quad (8.49)$$

Mit zunehmendem Exponent β entwickelt Γ 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. Bezeichnen $W''(j)$ und $\Gamma''(\varphi)$ die Matrizen der zweiten Ableitungen von W und Γ , dann gilt

$$W''(j) \Gamma''(\varphi) = \mathbb{1}, \quad (j, \varphi) \text{ dual.} \quad (8.50)$$

Diese Eigenschaft folgt unmittelbar aus den Relationen

$$\frac{\partial^2 W}{\partial j_r \partial j_s} = \frac{\partial \varphi_r}{\partial j_s} \quad \text{und} \quad \frac{\partial^2 \Gamma}{\partial \varphi_r \partial \varphi_s} = \frac{\partial j_r}{\partial \varphi_s}.$$

9. Als weitere Eigenschaften notieren wir:

Verhalten unter *Translationen*:

$$\begin{aligned} W(j) = W_1(j) + b &\Rightarrow (\mathcal{L}W)(\varphi) = (\mathcal{L}W_1)(\varphi) - b \\ W(j) = W_1(j + k) &\Rightarrow (\mathcal{L}W)(\varphi) = (\mathcal{L}W_1)(\varphi) - \varphi \cdot k \end{aligned} \quad (8.51)$$

Verhalten unter *Inversion*:

$$W(j) = W_1^{-1}(j) \Rightarrow (\mathcal{L}W)(\varphi) = -\varphi \cdot (\mathcal{L}W_1) \left(\frac{1}{\varphi} \right). \quad (8.52)$$

Nach dieser Erinnerung an wesentliche Eigenschaften der LEGENDRE-Transformation kehren wir zur Quantenfeldtheorie zurück.

8.2.3 Effektives Potential in der Quantenmechanik

Wir untersuchen zuerst Quantenfeldtheorien in $1+0$ Dimensionen, d.h. quantenmechanische Systeme für die der Feldoperator gleich dem Ortsoperator ist. Wir notieren, dass die SCHWINGER-Funktion konvex ist, da gemäß (8.32) und wegen der Translationsinvarianz in der EUKLIDischen Zeit

$$\frac{d^2}{dj^2} W(\beta, j) = \int_0^\beta d\tau \langle \hat{q}(\tau) \hat{q}(0) \rangle_{j,c} \geq 0, \quad (8.53)$$

gilt. Die verbundene Zweipunktfunktion wird dabei in Anwesenheit der Quelle, also mit Wirkung $S_E - j \int q$ berechnet. Die Krümmung der SCHWINGER-Funktion ist damit proportional zur *Suszeptibilität*. Divergiert diese, dann wird $W(\beta, j)$ einen Knick aufweisen.

Für eine alternative Form der SCHWINGER-Funktion und des effektiven Potentials erinnern wir uns an die variationelle Charakterisierung der Grundzustandsenergie,

$$-E_0(j) = W(j) = \sup_{\rho} \langle j\hat{q} - \hat{H} \rangle_{\rho} = \sup_q \left(jq - \inf_{\text{Sp } \rho \hat{q} = q} \langle \hat{H} \rangle_{\rho} \right). \quad (8.54)$$

Für niedrige Temperaturen strebt die SCHWINGER-Funktion $W(\beta, j)$ in (8.31) gegen die negative Grundzustandsenergiedichte $-E_0(j)/V$ des um $-j\hat{q}$ verschobenen HAMILTON-Operators, in der Quantenmechanik also gegen $-E_0(j)$. Nach der Variationsprinzip von RAYLEIGH und RITZ ist deshalb die SCHWINGER-Funktion für niedrige Temperaturen, $W(\beta \rightarrow \infty, j)$, gleich der Funktion W in (8.54).

Die Dichtematrizen ρ bilden eine konvexe und kompakte Menge, so dass das Supremum des linearen Funktionals $\rho \rightarrow \langle j\hat{q} - \hat{H} \rangle_{\rho} = \text{tr } \rho(j\hat{q} - \hat{H})$ für Dichtematrizen auf dem Rand dieser Menge, also generisch für reine Zustände angenommen wird. Ist der minimierende Randzustand ein Gemisch

$$\rho = \alpha\rho_1 + (1 - \alpha)\rho_2 \equiv \rho_{\alpha} \quad (8.55)$$

mit zwei reinen Zuständen ρ_1, ρ_2 und $\alpha \in [0, 1]$, dann ist $\langle j\hat{q} - \hat{H} \rangle_{\rho_{\alpha}}$ unabhängig von α .

Die Zwangsbedingung $\langle \hat{q} \rangle_{\rho} = q$ definiert für jedes feste q eine „Ebene“ im Raum der Zustände. Der minimierende Zustand ρ in

$$\Gamma(q) = \inf_{\text{Sp } \rho \hat{q} = q} \langle \hat{H} \rangle_{\rho} \quad (8.56)$$

liegt im Durchschnitt dieser Ebene mit dem Rand der Menge aller Zustände. Seien nun ρ_i zwei Zustände, welche die Energie unter den Nebenbedingungen $\langle \hat{q} \rangle_{\rho_i} = q_i$ minimieren,

$$\Gamma(q_i) = \langle \hat{H} \rangle_{\rho_i} \quad i = 1, 2. \quad (8.57)$$

Für die zwischen ρ_1 und ρ_2 interpolierenden Zustände ρ_{α} in (8.55) interpoliert der mittlere Ort $q_{\alpha} = (1 - \alpha)q_1 + \alpha q_2$ zwischen q_1 und q_2 . Es gilt

$$\Gamma(q_{\alpha}) \leq \langle \hat{H} \rangle_{\rho_{\alpha}} = (1 - \alpha)\langle \hat{H} \rangle_{\rho_1} + \alpha\langle \hat{H} \rangle_{\rho_2} = (1 - \alpha)\Gamma(q_1) + \alpha\Gamma(q_2). \quad (8.58)$$

Daraus folgt sofort die Konvexität des variationell definierten *effektiven Potentials* (8.56) Aus (8.54) lesen wir ab, dass W die LEGENDRE-Transformierte des konvexen Γ ist und aus den vorherigen Resultaten über die Eigenschaften der LEGENDRE-Transformation folgt,

dass umgekehrt Γ die LEGENDRE-Transformierte von W ist,

$$\Gamma(q) = \sup_j (jq - W(j)) \quad \text{und} \quad W(j) = \sup_q (jq - \Gamma(q)). \quad (8.59)$$

Das Infimum von Γ ist

$$\inf_q \Gamma(q) = \inf_q \inf_{\langle \hat{q} \rangle_\rho = q} \langle \hat{H} \rangle_\rho = \inf_\rho \langle \hat{H} \rangle_\rho = E_0 (j = 0), \quad (8.60)$$

also die Grundzustandsenergie des HAMILTON-Operators ohne Quelle.

Der minimierte Ort q ist gerade der Erwartungswert des Ortsoperators im minimierenden Zustand ρ . Ist ρ rein, dann ist q der eindeutige Erwartungswert von \hat{q} im Grundzustand. Im anderen Fall kann ρ als konvexe Kombination von zwei reinen Zuständen ρ_1 und ρ_2 mit gleichen Energien geschrieben werden. Dann hat jede konvexe Linearkombination von q_1 und q_2 , wobei $q_i = \text{tr } \rho_i \hat{q}$ ist, denselben Wert von Γ . Wir folgern, dass in diesem Fall Γ nicht strikt konvex ist. Die Ungleichung (8.58) wird dann zu einer Gleichung und Γ entwickelt ein Plateau. Die entsprechende SCHWINGER-Funktion hat einen Knick. Diese Möglichkeit ist für quantenmechanische Systeme mit kurzreichweitigen Wechselwirkungen allerdings nicht realisiert. Aber Spinmodelle oder Feldtheorien in zwei oder mehr Dimensionen können Phasenübergänge erleiden und in diesen Fällen hat W mindestens einen Knick und Γ mindestens ein Plateau.

8.2.4 Constraint effective potential

Wir folgen hier im Wesentlichen dem Papier [52] in dem das sogenannte *constraint effective potential* eingeführt und diskutiert wurde.

Das Minimum φ_0 des konventionellen effektiven Potentials $\Gamma(\Omega, \varphi)$ ist eindeutig im endlichen Volumen oder wenn das klassische Potential konvex ist oder aber beides zutrifft. Ist das klassische Potential nicht konvex, wie in Systemen mit spontaner Symmetriebrechung, dann gibt es mehrere minimierende Punkte φ_0 von $\Gamma(\varphi) = \Gamma(\infty, \varphi)$. Diese liegen auf einer Hyperebene im Targetraum (dem Plateau). In diesem Fall ist das Vakuum durch $\Gamma(\varphi)$ allein nicht bestimmt, sondern nur durch $\Gamma(\varphi)$ plus der Richtung, aus dem sich die Trigger-Quelle j dem singulären Punkt von W annähert. Der Trigger zwingt das System in einen reinen Zustand. Wir haben argumentiert, dass der Erwartungswert φ in einem reinen Zustand am Ende des Plateau von Γ liegt.

Für unendliche Ω und nicht-konvexe klassische Potentiale hat die Schleifen-Entwicklung Probleme und ein direkter nicht-störungstheoretischer Zugang ist wünschenswert. Dann ist Γ aber eher eine ungeeignete Größe. Zum Beispiel gibt es keine explizite Pfadintegral-Darstellung für dieses Potential. Eine einfachere und im Pfadintegral-Zugang direkt zu-

gängliche Größe ist dagegen das *constraint effective potential* [52]

$$\exp(-\Omega U(\Omega, \varphi)) = \int \mathcal{D}\phi \delta(M - \varphi) e^{-S[\phi]}, \quad M = \frac{1}{\Omega} \int d^d x \phi(x). \quad (8.61)$$

Ist die klassische Wirkung (und das Mass) invariant unter der Symmetriegruppe G , dann ist $U(\Omega, \varphi)$ ebenfalls invariant. Das constraint effective potential hatten wir für das ISING-Modell bereits in (5.7) eingeführt. Es hat eine einfache wahrscheinlichkeitstheoretische Bedeutung, da

$$P(\varphi) \equiv \frac{e^{-\Omega U(\Omega, \varphi)}}{\int d\varphi e^{-\Omega U(\Omega, \varphi)}} \quad (8.62)$$

die Wahrscheinlichkeitsdichte dafür ist, das System mit einem mittleren Feld φ zu finden. In Spinmodellen ist φ die Magnetisierung. Die Wahrscheinlichkeit dafür, das System mit einem φ weg von den Minimas von U zu finden, verschwindet für $\Omega \rightarrow \infty$.

Multiplizieren wir beide Seiten von (8.61) mit $\exp(\Omega j\varphi)$ und integrieren über φ , dann finden wir

$$\int e^{\Omega[j\varphi - U(\Omega, \varphi)]} d\varphi = e^{\Omega W(\Omega, j)}. \quad (8.63)$$

Damit ist W über eine LAPLACE-Transformation mit U verbunden. Da Γ die LEGENDRE-Transformierte von W ist, kann $\Gamma(\Omega, \varphi)$ aus $U(\Omega, \varphi)$ eindeutig berechnet werden. Umgekehrt ist W die LEGENDRE-Transformierte von Γ , und U kann aus Γ über eine inverse LAPLACE-Transformation bestimmt werden. Es gibt eine ein-eindeutige Beziehung zwischen den effektiven Potentialen $U(\Omega, \varphi)$ und $\Gamma(\Omega, \varphi)$.

Nun diskutieren wir den thermodynamischen Grenzfall $\Omega \rightarrow \infty$. In diesem Limes wird die Sattelpunktsnäherung des gewöhnlichen Integrals (8.63) exakt, und

$$W(j) = \sup_{\varphi} (j\varphi - U(\varphi)) = (\mathcal{L}U)(j). \quad (8.64)$$

Deshalb ist wegen $\Gamma = \mathcal{L}W = \mathcal{L}^2 U$ das konventionelle effektive Potential Γ die konvexe Hülle des constraint effektiven Potentials U . Obwohl $U(\Omega, \varphi)$ für endliche Volumen im Allgemeinen nicht konvex ist, kann man beweisen, dass es im thermodynamischen Limes $\Omega \rightarrow \infty$ konvex wird [52], so dass

$$\Gamma(\varphi) = U(\varphi). \quad (8.65)$$

Im unendlichen Volumen sind beide effektiven Potentiale identisch. Im endlichen Volumen sind sie im Allgemeinen verschieden, insbesondere braucht $U(\Omega, \varphi)$ nicht konvex zu sein.

Das constraint effektive Potential ist besonders nützlich bei der Untersuchung einer spontanen Symmetriebrechung. Dazu betrachtet man die Momente

$$\frac{\int \varphi^p \exp \{ \Omega(j\varphi - U(\Omega, \varphi)) \} d\varphi}{\int \exp \{ \Omega(j\varphi - U(\Omega, \varphi)) \} d\varphi} = \frac{1}{\Omega^p} \int d^d x_1 \dots d^d x_p \langle \phi(x_1) \dots \phi(x_d) \rangle_j^\Omega, \quad (8.66)$$

d.h. die über Raum und Zeit gemittelten SCHWINGER-Funktionen im endlichen System. Für $p = 1$ finden wir den Erwartungswert des Feldes mit äusserer Quelle,

$$\langle \phi(x) \rangle_j^\Omega = \frac{1}{Z(j)} \int \varphi e^{\Omega\{j\varphi - U(\Omega, \varphi)\}} d\varphi. \quad (8.67)$$

Im endlichen Volumen bedingt eine Symmetrie $U(\varphi) = U(-\varphi)$ einen verschwindenden Erwartungswert bei ausgeschalteter Quelle, $\langle \hat{\phi} \rangle_0^\Omega = 0$. Um ein nicht-triviales mittleres Feld zu finden, müssen wir zuerst den thermodynamischen Grenzfall durchführen und erst danach den Trigger j ausschalten. Verbleibt ein nicht-trivialer Erwartungswert für $j = 0$, dann liegt eine *spontane Symmetriebrechung* vor.

Für $p = 2$ und $j = 0$ lautet die Formel (8.66)

$$\frac{1}{Z(j)} \int \varphi^2 e^{\Omega\{j\varphi - U(\Omega, \varphi)\}} d\varphi = \frac{1}{\Omega^2} \int d^d x d^d y \langle \phi(x) \phi(y) \rangle_0^\Omega. \quad (8.68)$$

Der Erwartungswert auf der rechten Seite ist die Zweipunkt-SCHWINGER-Funktion, die nur vom $x - y$ abhängt. Deshalb finden wir folgende explizite Formel für die Suszeptibilität des Systems,

$$\chi = \int S_2(x) d^d x = \Omega \frac{\int \varphi^2 e^{-\Omega U(\Omega, \varphi)} d\varphi}{\int e^{-\Omega U(\Omega, \varphi)} d\varphi}. \quad (8.69)$$

Ähnliche Formeln findet man für die höheren Momente des Wahrscheinlichkeitsmasses $P(\varphi)$ in (8.62).

8.3 Schleifenentwicklung für $\Gamma[\varphi]$

Um die Schleifenentwicklung (loop-expansion) für die effektive Wirkung oder das effektive Potential zu berechnen zerlegen wir die klassische Wirkung in ihren quadratischen Anteil $S_0[\phi]$ und den die Selbstwechselwirkung beschreibenden Restterm $V[\phi] = \int dx V(\phi)$. Das erzeugende Funktional

$$Z[j] = e^{W[j]} = \int \mathcal{D}\phi \exp(-S[\phi] + (j, \phi)), \quad (j, \phi) = \int d^d x j(x)\phi(x), \quad (8.70)$$

mit beliebiger x -abhängiger Quelle definiert das SCHWINGER-*Funktional* $W[j]$. Das SCHWINGER-Funktional erzeugt die verbundenen Korrelationsfunktionen.

Seine LEGENDRE-Transformierte Γ erzeugt die Einteilchen-irreduziblen FEYNMAN-Graphen und heisst *effektive Wirkung*. Für eine homogene Quelle ist $W[j]$ bis auf einen Volumenfaktor die SCHWINGER-Funktion $W(j)$ in (8.36). Das konjugierte mittlere Feld ist dann ebenfalls konstant und für konstantes φ ist $\Gamma[\varphi]$ bis auf einen Volumenfaktor gleich dem konventionellen effektiven Potential $\Gamma(\varphi)$.

Wir führen einen Entwicklungsparameter a ein, der die Schleifen zählt. Das Funktional

$$Z[j] = \exp\left(\frac{1}{a}W[j]\right) = \int \mathcal{D}\phi \exp\left(-\frac{1}{a}S_0 + \frac{1}{a}(j, \phi) - \frac{1}{a}V[\phi]\right) \quad (8.71)$$

hat die störungstheoretische Entwicklung

$$\begin{aligned} Z[j] &= \sum \frac{(-1)^n}{n!} \int \mathcal{D}\phi \left(\frac{1}{a} \int dx V(\phi(x))\right)^n \exp\left(-\frac{1}{a}S_0[\phi] + \frac{1}{a}(j, \phi)\right) \\ &= \sum \frac{(-1)^n}{n!} \left(\frac{1}{a} \int dx V\left(\frac{\delta}{\delta j(x)}\right)\right)^n \exp\left(\frac{a}{2} \int j \Delta_{\text{F}} j\right). \end{aligned} \quad (8.72)$$

Wir haben in Potenzen des Potentialterms $V[\phi] = \int d^d x V(\phi)$ entwickelt und die resultierenden GAUSSschen Integrale über $\mathcal{D}\phi$ berechnet. Jeder Propagator wird mit einem Faktor a und jeder Wechselwirkungsvertex mit einem Faktor $1/a$ multipliziert. Ein Graph mit I inneren Linien in der n 'ten Ordnung Störungstheorie wird mit dem Faktor a^{I-n} multipliziert. Die Anzahl unabhängiger Impulsintegrationen ist gleich der Anzahl Schleifen L , wobei wegen der Impulserhaltung an jedem Vertex die Beziehung

$$L = I - (n - 1) \quad (8.73)$$

gilt. Deshalb ist die Entwicklung in a eine Schleifenentwicklung. Diagramme mit L Schleifen sind von der Ordnung a^{L-1} . Diagramme ohne Schleifen, d.h. der klassische Beitrag zu W , ist von der Ordnung a^{-1} und die Einschleifenbeiträge von der Ordnung a^0 .

Im Folgenden wollen wir annehmen, das Quantisierungsvolumen Ω habe keine Ränder. Bei endlichen Temperaturen ist Ω typisch ein Zylinder und bei Temperatur $T = 0$ der ganze Raum oder ein d -dimensionaler Torus. Für Systeme mit Rand ist die Schleifenentwicklung etwas aufwendiger, siehe zum Beispiel [55].

8.3.1 Klassischer Beitrag

Mit der Sattelpunktmethode finden wir für $a \rightarrow 0$

$$\int \mathcal{D}\phi \exp \left\{ -\frac{1}{a} (S[\phi] - (j, \phi)) \right\} \sim \exp \left\{ -\frac{1}{a} \inf_{\phi} (S[\phi] - (j, \phi)) \right\}, \quad (8.74)$$

und der klassische Beitrag führt auf die LEGENDRE-Transformierte von S ,

$$W_0[j] = \sup_{\phi} \{ (j, \phi) - S[\phi] \} = (\mathcal{L}S)([j]). \quad (8.75)$$

Die effektive Wirkung ist nach Definition die LEGENDRE-Transformierte von W , d.h.

$$\Gamma_0[\varphi] = (\mathcal{L}^2 S)[\varphi]. \quad (8.76)$$

Speziell für konvexe V ist das maximierende Feld eindeutig durch die klassische Bewegungsgleichung in Anwesenheit der äusseren Quelle bestimmt,

$$j(x) = \left. \frac{\delta S}{\delta \phi(x)} \right|_{\phi=\varphi_{\text{cl}}}, \quad (8.77)$$

und in führender Ordnung ist Γ gleich der klassischen Wirkung,

$$\Gamma_0[\varphi] = S[\varphi]. \quad (8.78)$$

Der formale Entwicklungsparameter a kann als Wirkungskonstante in Einheiten von \hbar interpretiert werden. In diesem Sinne ist die a -Entwicklung eine *semiklassische Entwicklung*. Dies ist in völligem Einklang mit dem Ergebnis (8.78)

8.3.2 Einschleifen-Beitrag

Es sei φ_{cl} das $(j, \phi) - S[\phi]$ maximierende klassische Feld. Wir machen den Ansatz

$$\phi = \varphi_{\text{cl}} + \sqrt{a}\psi \quad (8.79)$$

mit Fluktuationfeld ψ und setzen diesen in $S - (j, \phi)$ ein. Da φ_{cl} diesen Ausdruck minimiert, ist

$$S[\phi] - (j, \phi) = S[\varphi_{\text{cl}}] - (j, \varphi_{\text{cl}}) + \frac{a}{2} \int \psi(x) K(x, y) \psi(y) + O(a^{3/2}), \quad (8.80)$$

mit Krümmungsterm

$$K(x, y) = \frac{\delta^2 S}{\delta\phi(x)\delta\phi(y)} \Big|_{\varphi_{\text{cl}}}. \quad (8.81)$$

Dies setzen wir in (8.71) ein. Wegen $\mathcal{D}\phi = \text{const} \cdot \mathcal{D}\psi$ erhalten wir

$$Z[j] = \exp \{ a^{-1} W_0[j] \} \int \mathcal{D}\psi e^{-\frac{1}{2}(\psi, K\psi) + O(a^{1/2})}. \quad (8.82)$$

Die Integration ergibt $\det^{-1/2} K$, und wir finden das SCHWINGER-Funktional

$$W[j] = \int j\varphi_{\text{cl}} - S[\varphi_{\text{cl}}] - \frac{a}{2} \log \det K + O(a^{3/2}). \quad (8.83)$$

Die Entwicklung von W führt auf eine entsprechende Entwicklung des mittleren Feldes φ ,

$$W[j] = \sum a^n W_n[j] \implies \varphi(x) = \sum a^n \varphi_n(x), \quad \varphi_n = \frac{\delta W_n}{\delta j}. \quad (8.84)$$

Speziell ist in führender Ordnung

$$\varphi_0 = \frac{\delta W_0}{\delta j} = \varphi_{\text{cl}} + \int \left(j - \frac{\delta S}{\delta\phi} \right) \Big|_{\varphi_{\text{cl}}} \frac{\delta\varphi_{\text{cl}}}{\delta j} \stackrel{(8.77)}{=} \varphi_{\text{cl}}, \quad (8.85)$$

und bis zur ersten Ordnung gilt

$$\varphi = \varphi_{\text{cl}} + a \frac{\delta W_1}{\delta j} + O(a^2). \quad (8.86)$$

Für den zweiten Term auf der rechten Seite erhalten wir

$$\frac{\delta W_1}{\delta j(x)} = \int dy \frac{\delta W_1}{\delta\varphi(y)} \frac{\delta\varphi(y)}{\delta j(x)}.$$

Für den letzten Faktor dürfen wir

$$\frac{\delta j(x)}{\delta\varphi(y)} = \frac{\delta^2 S}{\delta\varphi(x)\delta\varphi(y)} \Big|_{\varphi_{\text{cl}}} + O(a) \equiv K(x, y) + O(a)$$

benutzen. Eingesetzt in (8.86) ergibt sich

$$\varphi(x) = \varphi_{\text{cl}}(x) + a \int dy \frac{\delta W_1}{\delta\varphi(y)} K_{xy}^{-1}(\varphi) + O(a^2). \quad (8.87)$$

Nun können wir den Einschleifenbeitrag zur effektiven Wirkung berechnen,

$$\begin{aligned}\Gamma(\varphi) &= (j, \varphi) - W_0 - aW_1 + O(a^2) \\ &= (j, \varphi) - (j, \varphi_{\text{cl}}) + S[\varphi_{\text{cl}}] - aW_1[\varphi] + O(a^2) \\ &= S[\varphi] - aW_1[\varphi] + O(a^2).\end{aligned}\tag{8.88}$$

Beim letzten Schritt durften wir φ_{cl} durch φ ersetzen, da φ_{cl} ein stationärer Punkt von $(j, \varphi) - S[\varphi]$ ist und der dabei entstehende Fehler von der Ordnung $O(a^2)$ ist. Für einen homogenen Strom ist φ ebenfalls homogen und wir finden für das effektive Potential $\Gamma(\varphi) = \Gamma[\varphi]/\Omega$ die einfache Formel

$$\Gamma(\varphi) = V(\varphi) + \frac{\hbar}{2\Omega} \log \det K(\varphi),\tag{8.89}$$

wobei wir durch die Ersetzung $a \rightarrow \hbar$ die explizite \hbar -Abhängigkeit wiederherstellten. Wir betrachten ein einkomponentiges ungeladenes Skalarfeld mit EUKLIDischer Wirkung

$$S = \int dx \left(-\frac{1}{2}(\phi, \Delta\phi) + V(\phi) \right).\tag{8.90}$$

Die zweite Ableitung der Wirkung ist

$$K(x, y) = (-\Delta + V''(\varphi)) \delta(x - y).\tag{8.91}$$

und wir verbleiben mit der Berechnung der Funktionaldeterminante,

$$\Gamma(\varphi) = V(\varphi) + \frac{\hbar}{2\Omega} \log \det (-\Delta + V''(\varphi)).\tag{8.92}$$

Für konstantes φ können wir V'' als effektive Masse behandeln. Wählen wir für Ω einen Zylinder mit periodischer EUKLIDischer Zeit, dann dürfen wir das Resultat (8.30) mit der Ersetzung $m^2 \rightarrow V'' \ll T^2$ für die regularisierte Determinante übernehmen. Wir zerlegen das effektive Potential bei Temperatur $1/\beta$ in einen „Vakuanteil“ und einen thermischen Anteil,

$$\Gamma(\varphi) = \Gamma^{T=0}(\varphi) + \Gamma^{T>0}(\varphi)\tag{8.93}$$

mit

$$\Gamma^{T=0}(\varphi) = V(\varphi) + \frac{\hbar}{64\pi^2} V''(\varphi)^2 \log \frac{V''(\varphi)}{\mu^2},\tag{8.94}$$

$$\Gamma^{T>0}(\varphi) = -\frac{\hbar\pi^2}{90} T^4 + \frac{\hbar}{24} V''(\varphi) T^2 - \frac{\hbar}{34\pi^2} (V''(\varphi))^2 \log \frac{V''(\varphi)}{(4\pi T)^2} + \dots\tag{8.95}$$

Dabei wurde ein dem Problem angepasster Massenparameter μ eingeführt. Tatsächlich stimmen die Resultate (8.94,8.95) und (8.30) nur bis auf einen Term proportional zu $V''(\varphi)^2$ überein. Dieser hat für eine störungstheoretisch renormierbare Theorie dieselbe Form wie das klassische Potential V und kann durch eine endliche Renormierung der Parameter in V absorbiert werden. Diese Änderung der Parameter ist von erster Ordnung in der Schleifenentwicklung und die neuen Parameter dürfen in den Einschleifenbeiträgen benutzt werden.

Wir betrachten das Potential

$$V(\phi) = -\frac{m_0^2}{2}\phi^2 + \frac{\lambda_0}{4}\phi^4. \quad (8.96)$$

Für schwache Kopplung und hohe Temperaturen ist die effektive Masse

$$m^2(T) = -m^2 + \frac{\hbar}{4}\lambda T^2. \quad (8.97)$$

und wechselt ihr Vorzeichen bei

$$T_c = \frac{4m^2}{\hbar\lambda}. \quad (8.98)$$

Oberhalb dieser Temperatur ist der Ursprung ein Minimum und unterhalb ein Maximum. Für schwache Kopplungen ist T_c eine gute Näherung für die *kritische Temperatur* des Systems mit \mathbb{Z}_2 -symmetrischen Potential (8.96). Erwärmt man das bei tiefen Temperaturen spontan gebrochene System, dann wird für $T > T_c$ die Symmetrie wiederhergestellt. Es ist die CURIE-Temperatur für die ϕ^4 -Theorie mit Ordnungsparameter φ .

Für nicht-konvexe $V(\phi)$ wird das störungstheoretische effektive Potential komplex an Stellen, wo die Krümmung von V negativ ist. Im Gegensatz zum exakten Potential ist es in der Schleifenentwicklung weder konvex noch reell. Eine verbesserte Approximation ohne diese Probleme wurde in [53] entwickelt.

Kapitel 9

Skalares Gitterfeld

In den kommenden Abschnitten des Kapitels machen wir von der Gitterregularisierung der Funktionalintegrale Gebrauch. Wir diskretisieren die EUKLIDSche Raumzeit \mathbb{R}^d und ersetzen sie durch ein d -dimensionales Gitter Λ . Für ein endliches Λ geht das formale Funktionalintegral in ein gewöhnliches $|\Lambda|$ -dimensionales Integral über, dass mit den Methoden der statistischen Mechanik behandelt wird.

In der Gitterregularisierung des EUKLIDSchen Funktionalintegrals (8.5) wird die EUKLIDSche Raumzeit \mathbb{R}^d durch ein d -dimensionales Gitter Λ ersetzt und das Skalarfeld ϕ auf \mathbb{R}^d durch ein Gitterfeld (eine 0-Kette),

$$\phi = \sum_{x \in \Lambda} \phi_x \langle x \rangle \equiv \sum_{x \in \Lambda} \phi(x) \langle x \rangle. \quad (9.1)$$

Das Gitter $\Lambda \subset \mathbb{Z}^d$ wird oft sowohl aus theoretischen wie auch aus praktischen Gründen zunächst als endlich angenommen. Als Randbedingung auf dem hyperkubischen Gitter wird meistens eine der folgenden Bedingungen auferlegt:

- Periodische Randbedingungen

$$\phi(x + Le_\mu) = \phi(x), \quad \mu = 1, \dots, d. \quad (9.2)$$

Mit diesen Randbedingungen wird das Gitter zum 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 Gittereichtheorien beliebt. Wir werden in diesem Kapitel periodische Randbedingungen auferlegen.

9.1 Das freie Skalarfeld

Die EUKLIDSche Wirkung des freien KLEIN-GORDON Feldes (8.9) soll nun durch eine Funktion des Gitterfeldes ersetzt werden. Es ist naheliegend, die partiellen Ableitungen durch Differenzen der Felder an benachbarten Gitterpunkten zu ersetzen. Wir erinnern daran, wie der Co-Randoperator d auf eine 0-Kette wirkt,

$$d\phi = \sum_{\langle xy \rangle} (\phi(x) - \phi(y)) \langle yx \rangle. \quad (9.3)$$

Mit dem im Abschnitt 6.5 eingeführten inneren Produkt zwischen Ketten können wir die diskretisierte Wirkung wie folgt schreiben,

$$\begin{aligned} S &= \frac{1}{2}(d\phi, d\phi) + \frac{m^2}{2}(\phi, \phi) = \frac{1}{2} \sum_{\langle xy \rangle} (\phi(x) - \phi(y))^2 + \frac{m^2}{2} \sum_x \phi^2(x) \\ &= \frac{1}{2}(m^2 + 2d) \sum_x \phi^2(x) - \sum_{\langle xy \rangle} \phi(x)\phi(y). \end{aligned} \quad (9.4)$$

Interpretieren wir ϕ als Vektor in \mathbb{R}^V , dann lautet die rechte Seite

$$S = \frac{1}{2}(\phi, K\phi), \quad K(x, y) = (m^2 + 2d) \delta_{xy} - \sum_{\mu=1}^d (\delta_{x, y+e_\mu} + \delta_{x, y-e_\mu}). \quad (9.5)$$

Für eine positive Masse m ist die symmetrische Matrix K positiv.

Die Bestimmung der 2-Punktfunktion der freien EUKLIDSchen Theorie reduziert sich auf die Berechnung eines einfachen GAUSSschen Integrals,

$$\begin{aligned} \langle \phi(x)\phi(y) \rangle &= \frac{1}{Z} \int \mathcal{D}\phi \phi(x)\phi(y) e^{-\frac{1}{2}(\phi, K\phi)} \\ Z &= \int \mathcal{D}\phi e^{-\frac{1}{2}(\phi, K\phi)}, \quad \mathcal{D}\phi = \prod_{x \in \Lambda} d\phi(x). \end{aligned} \quad (9.6)$$

Derartige Integrale wurden im zweiten Kapitel besprochen. Wir finden folgenden Propa-

gator für das KLEIN-GORDON-Feld auf dem Gitter,

$$\langle \phi(x)\phi(y) \rangle = (K^{-1})(x, y) \equiv G(x, y). \quad (9.7)$$

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 zirkulant. Die Anzahl Gitterpunkte in jede Richtung sei N , so dass die Gesamtzahl Gitterpunkte $V = |\Lambda| = N^d$ ist.

Wegen der Translationsinvarianz auf dem diskreten Torus haben die V orthonormierten Eigenvektoren φ_p der symmetrischen Matrix K die Form

$$\varphi_p(x) = \frac{1}{\sqrt{V}} \exp(ipx) \quad \text{mit} \quad px = \sum_{\mu=1}^N p_\mu x^\mu. \quad (9.8)$$

Wegen der periodischen Randbedingungen liegen die Gitterimpulse auf dem *dualen Gitter*,

$$p_\mu = \frac{2\pi}{L} n_\mu \in \Lambda^*, \quad n_\mu \in \{1, 2, \dots, N\}. \quad (9.9)$$

Die zugehörigen V Eigenwerte lauten

$$\lambda(n) = m^2 + 2d - 2 \sum_{\mu} \cos(p_\mu) = m^2 + \hat{p}^2, \quad \hat{p}_\mu = 2 \sin(\frac{1}{2}p_\mu). \quad (9.10)$$

Für den Propagator ergibt sich die Reihendarstellung

$$\langle \phi(x)\phi(y) \rangle = \sum \frac{\varphi_p(x)\varphi_p^\dagger(y)}{\lambda(n)} = \frac{1}{V} \sum_{\{p_\mu\}} \frac{e^{ip(x-y)}}{m^2 + \hat{p}^2}. \quad (9.11)$$

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 (9.11)

$$\langle \phi(x)\phi(0) \rangle = \frac{1}{(2\pi)^d} \sum_{\{p_\mu\}} \Delta p_1 \cdots \Delta p_d \frac{e^{ipx}}{m^2 + \hat{p}^2}$$

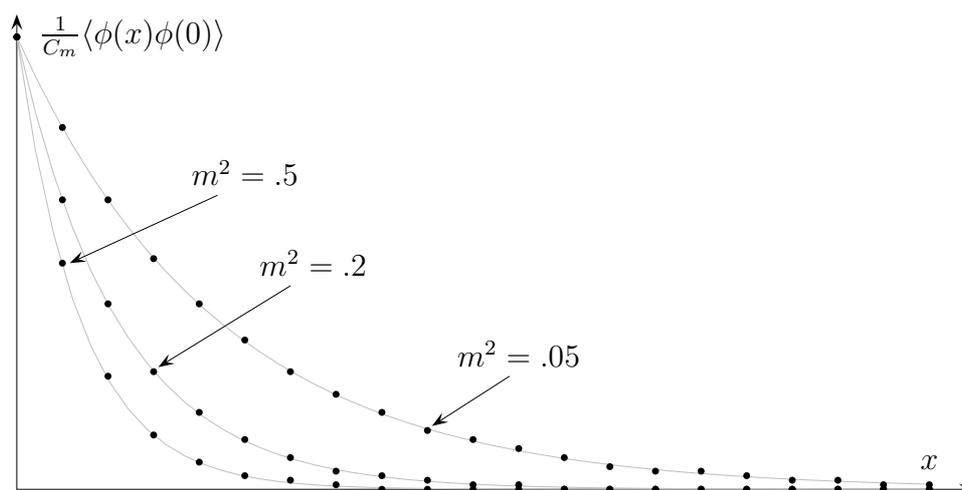
mit $\Delta p_\mu = 2\pi/L$, strebt dann gegen das folgende INTEGRAL über die BRILLOIN-Zone,

$$\begin{aligned} \langle \phi(x)\phi(0) \rangle &\xrightarrow{N \rightarrow \infty} \frac{1}{(2\pi)^d} \int_0^{2\pi} d^d p \frac{e^{ipx}}{m^2 + \hat{p}^2} \\ &= \frac{1}{(2\pi)^d} \int_0^{2\pi} d^d p \frac{\cos(px)}{m^2 + \hat{p}^2}, \quad \hat{p}_\mu = 2 \sin \frac{p_\mu}{2}. \end{aligned} \quad (9.12)$$

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

$$\langle \phi(0)\phi(0) \rangle \equiv C_m = \frac{1}{m\sqrt{m^2 + 4}} \quad (9.13)$$

In der folgenden 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 (9.12) allerdings enorm um den exponentiellen Fit.

9.1.1 Fehlende Leibniz-Regel auf dem Gitter

Einige Probleme von Gitterfeldtheorien sind in der fehlenden LEIBNIZ-Regel 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 LEIBNIZ-Regel*

$$D(f \cdot g) = (Df) \cdot g + f \cdot (Dg), \quad \forall f, g : \Lambda \rightarrow \mathbb{C}, \quad (9.14)$$

erfüllt, ist trivial, $D = 0$.

Beim Beweis benutzen wir die LEIBNIZ-Regel 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} ,

$$(Df)(x) = \sum_{z \in \Lambda} D_{xz} f(z). \quad (9.15)$$

Dann lautet die LEIBNIZ-Regel

$$\sum_z D_{xz} f(z) g(z) = g(x) \sum_z D_{xz} f(z) + f(x) \sum_z D_{xz} g(z). \quad (9.16)$$

Wählen wir für f und g die charakteristische Funktion δ_y , wobei $\delta_y(z) = \delta_{y,z}$ ist, dann vereinfacht sie die Regel (9.16) zu

$$D_{xy} = D_{xy} \delta_{y,x} + D_{xy} \delta_{y,x}. \quad (9.17)$$

Daraus folgt sofort $D_{xy} = 0$ für alle $x, y \in \Lambda$. Das obige Lemma schliesst nicht aus, dass für spezielle Gitterfunktionen die LEIBNIZ-Regel gilt.

Für periodische Gitterfunktionen werden wir fordern, dass

$$\sum_{x \in \Lambda} (Df)(x) = 0 \quad (9.18)$$

gilt, in Anlehnung an die entsprechend Formel für Felder auf \mathbb{R}^d . Die Links- und Rechtsableitungen auf dem Gitter erfüllen diese Forderung.

9.2 2-Punktfunktion als Wegintegral

Wir werden nun zeigen, dass sich die 2-Punktfunktion des freien KLEIN-GORDON Feldes darstellen lässt als „gewichtete Summe über alle Wege“ von x nach y . Diese Darstellung ist nützlich für Abschätzungen und Näherungen. Wir betrachten die Größe

$$G(x) = e^{-\mu} \sum_{\text{Wege } 0 \rightarrow x} e^{-\mu \ell} = e^{-\mu} \sum_{\ell=0}^{\infty} P_{\ell}(x) e^{-\mu \ell} \quad (9.19)$$

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*,

$$(e^{ip_1} + e^{-ip_1} + \dots + e^{ip_d} + e^{-ip_d})^\ell = \sum_{x \in \mathbb{Z}^d} P_\ell(x) e^{i(p_1 x_1 + \dots + p_d x_d)}. \tag{9.20}$$

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, indem $e^{\pm ip_\mu}$ 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 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 verschieden 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 BRILLOUINzone $p_\mu \in [0, 2\pi)$ ergibt 0, solange der Exponent nicht verschwindet. Damit können wir die Polynome P_ℓ wie folgt gewinnen,

$$P_\ell(x) = \frac{1}{(2\pi)^d} \int_0^{2\pi} d^d p e^{-ipx} (e^{ip_1} + e^{-ip_1} + \dots + e^{ip_d} + e^{-ip_d})^\ell \tag{9.21}$$

Eingesetzt in (9.19) erhält man eine geometrische Reihe,

$$\begin{aligned} G(x) &= \frac{e^{-\mu}}{(2\pi)^d} \int_0^{2\pi} d^d p e^{-ipx} \sum_\ell \{2e^{-\mu} (\cos p_1 + \dots + \cos p_d)\}^\ell \\ &= \frac{e^{-\mu}}{(2\pi)^d} \int_0^{2\pi} d^d p \left(\frac{e^{-ipx}}{1 - 2e^{-\mu} \sum_\mu \cos p_\mu} \right) \\ &= \frac{1}{(2\pi)^d} \int_0^{2\pi} d^d p \left(\frac{e^{-ipx}}{e^\mu - 2d + 4 \sum_\mu \sin^2 \frac{p_\mu}{2}} \right). \end{aligned} \tag{9.22}$$

Wir erkennen die Integraldarstellung der Zweipunktfunktion des freien KLEIN-GORDON-

Feldes (9.12), vorausgesetzt wir wählen

$$e^\mu - 2d = m^2. \quad (9.23)$$

Die Auflösung nach μ ergibt

$$\langle \phi(x)\phi(0) \rangle = \frac{1}{(m^2 + 2d)} \sum_{\text{Weg } 0 \rightarrow x} \frac{1}{(m^2 + 2d)^\ell}. \quad (9.24)$$

9.3 Molekularfeldnäherung

Wir haben die Molekularfeldnäherung für SPIN-Modelle bei der Diskussion des ISING-Modells bereits kennengelernt. Dort wurde die Wechselwirkung eines Spins mit seinen Nachbarn durch seine mittlere Wechselwirkung mit allen Spins ersetzt. Diese Methode kann auf eine skalare Gitterfeldtheorie mit linearem Targetraum unmittelbar angewandt werden. Wir wählen hier aber einen anderen Weg, der über die variationelle Charakterisierung der Zustandssumme und der effektive Wirkung führt (siehe zum Beispiel [17]). Es sei μ ein Wahrscheinlichkeitsmass mit Dichte $p \geq 0$ auf dem Raum der Gitterfelder,

$$d\mu(\phi) = p(\phi) \mathcal{D}\phi, \quad \mathcal{D}\phi = \prod_{x \in \Lambda} d\phi(x), \quad (9.25)$$

Die BOLTZMANN-GIBBS-SHANNON-*Entropie* ist definiert als

$$S_B(\mu) = - \int \mathcal{D}\phi p(\phi) \log p(\phi). \quad (9.26)$$

Die Zustandssumme hat nun folgende variationelle Charakterisierung,

$$\log Z = - \inf_{\mu} \left(\int d\mu(\phi) S(\phi) - \hbar S_B \right). \quad (9.27)$$

Das Infimum ist bezüglich aller Wahrscheinlichkeitsmasse zu nehmen. Beim Beweis minimiert man den Ausdruck in den Klammern plus den Term $\lambda(\int d\mu(\phi) - 1)$ mit LAGRANGEschem Multiplikator λ . Das eindeutige Infimum bezüglich aller Wahrscheinlichkeitsmasse ist das GIBB-Mass,

$$d\mu(\phi) = \frac{1}{Z} e^{-S[\phi]/\hbar} \mathcal{D}\phi \quad \text{mit} \quad Z = \int \mathcal{D}\phi e^{-S[\phi]/\hbar}. \quad (9.28)$$

Die *effective Wirkung* ist nun

$$\Gamma[\varphi] = \inf_{\mu} \left(\int d\mu(\phi) S[\phi] - \hbar S_B(\mu) \mid \int d\mu(\phi) \phi = \varphi \right). \quad (9.29)$$

Hier wird bezüglich aller Wahrscheinlichkeitsmasse μ mit gegebenem mittleren Feld minimiert. Das resultierende $\Gamma[\varphi]$ ist konvex, da die Menge der Wahrscheinlichkeitsmasse konvex ist. Es ist die LEGENDRE-Transformierte des SCHWINGER-Funktional. Zum Beweis erzwingt man die Nebenbedingung in (9.29) mit Hilfe eines LAGRANGE-Multiplikatorfeldes $j(x)$. Zuerst minimiert man

$$\Gamma[\varphi] = \inf_{\mu} \left(\int d\mu(\phi) \left\{ S[\phi] - \int j(x)(\phi(x) - \varphi(x)) \right\} - \hbar S_B(\mu) \right).$$

bezüglich aller Wahrscheinlichkeitsmasse und findet die Lösung

$$d\mu_j(\phi) = \frac{1}{Z[j]} e^{-S[\phi]/\hbar + (j,\phi)} \mathcal{D}\phi \quad \text{mit} \quad Z[j] = \int \mathcal{D}\phi e^{-S[\phi]/\hbar + (j,\phi)} \equiv e^{W[j]}. \quad (9.30)$$

Eingesetzt in (9.29) findet man folgende einfache Formel für Γ ,

$$\Gamma[\varphi] = (j, \varphi) - W[j], \quad (9.31)$$

worin die Quelle j so zu wählen ist, dass die Nebenbedingung an das gemittelte Feld in (9.29) erfüllt ist,

$$\varphi(x) = \int d\mu_j(\phi) \phi(x) = \frac{\delta W[j]}{\delta j(x)}. \quad (9.32)$$

Das Resultat (9.31) zusammen mit der Nebenbedingung (9.32) bedeuten, dass Γ die LEGENDRE-Transformierte der SCHWINGER-Funktion ist,

$$\Gamma[\varphi] = \sup_j \left((j, \varphi) - W[j] \right) = (\mathcal{L}W)[\varphi]. \quad (9.33)$$

Nun bestimmen wir die Molekularfeldnäherung zu $\Gamma[\varphi]$. In dieser Näherung lässt man in der Minimierung in (9.29) nur Produktmasse zu,

$$d\mu(\phi) = \prod_x d\nu_x(\phi_x), \quad d\nu_x(\phi) = p_x(\phi) d\phi. \quad (9.34)$$

Dabei ist $\nu_x(\phi)$ ein Wahrscheinlichkeitsmass auf dem Targetraum des Skalarfeldes. Hier sieht man den ersten Vorteil der variationellen Methode. Die Ersetzung der Wechselwirkung von $\phi(x)$ mit seinen Nachbarn durch die mittlere Wechselwirkung mit allen Spins ist

problemlos möglich nur für lineare Targeträume. Für die variatonelle Methode entfällt diese Einschränkung. Die variationelle Methode zeigt auch, dass die Molekularfeldnäherung Γ_{MF} die exakte effektive Wirkung Γ von oben beschränkt,

$$\Gamma_{\text{MF}}[\varphi] \geq \Gamma[\varphi]. \quad (9.35)$$

Im Gegensatz zur Menge aller Wahrscheinlichkeitsmasse ist die Teilmenge der Produktmasse nicht konvex und deshalb braucht Γ_{MF} nicht konvex zu sein.

Zur Berechnung von Γ_{MF} notieren wir

$$p \log p = \prod_x p_x \sum_x \log p_x,$$

so dass die Entropie des Systems die Summe der Entropien auf den Gitterpunkten wird,

$$S_{\text{B}}(\nu) = \sum_x s_{\text{B}}(\nu_x), \quad s_{\text{B}}(\nu_x) = - \int d\phi p_x(\phi) \log p_x(\phi). \quad (9.36)$$

Die Zwangsbedingung in (9.29) faktorisiert,

$$\int d\nu_x(\phi) \phi = \varphi_x. \quad (9.37)$$

Um fortzufahren setzen wir die Standard-Wirkung

$$S[\phi] = \sum_x \left(\frac{1}{2} (\nabla \phi_x)^2 + V(\phi_x) \right) \quad (9.38)$$

für das Skalarfeld voraus. Mit Berücksichtigung der Nebenbedingung (9.37) gilt

$$\int d\nu(\phi) S[\phi] = \sum_x \left(\frac{1}{2} (\nabla \varphi_x)^2 + \int d\nu_x(\phi) V(\varphi_x, \phi) \right), \quad (9.39)$$

wobei wir das verschobene Potential

$$V(\varphi, \phi) = d(\varphi - \phi)^2 + V(\phi). \quad (9.40)$$

mit $V(\phi, \phi) = V(\phi)$ einführt. Deshalb ist die Molekularfeldnäherung für die effektive Wirkung gegeben durch

$$\Gamma_{\text{MF}}[\varphi] = \sum_x \left(\frac{1}{2} (\nabla \varphi_x)^2 + U_{\text{MF}}(\varphi_x) \right), \quad \text{mit}$$

$$U_{\text{MF}}(\varphi) = \inf_{\nu} \left\{ \int d\nu(\phi) \{V(\varphi, \phi) + \log p(\phi)\} \mid \int d\nu(\phi) \phi = \varphi \right\}. \quad (9.41)$$

Für das minimierende Wahrscheinlichkeitsmass findet man

$$d\nu(\phi) = \frac{1}{z_0} e^{j\phi - V_d(\phi)} d\phi, \quad V_d(\phi) = d\phi^2 + V(\phi), \quad z_0(j) = \int d\phi e^{j\phi - V_d(\phi)}, \quad (9.42)$$

wobei j aus der Selbstkonsistenzgleichung (Gapgleichung)

$$\varphi = \int d\nu(\phi) \phi = \frac{dw_0}{dj}, \quad w_0(j) = \log z_0(j) \quad (9.43)$$

zu berechnen ist. Für das minimierende Mass $d\nu(\phi)$ in (9.42) vereinfacht sich U_{MF} zu

$$U_{\text{MF}}(\varphi) = -d\varphi^2 + j\varphi - w_0(j) = -d\varphi^2 + (\mathcal{L}w_0)(\varphi). \quad (9.44)$$

Ist das mittlere Feld x -abhängig, so hängt die Quelle ebenfalls von x ab. Die *effektive Wirkung* in der Molekularfeldapproximation lautet

$$\Gamma_{\text{MF}}[\varphi] = \sum_x \left(\frac{1}{2} (\nabla \varphi_x)^2 + U_{\text{MF}}(\varphi_x) \right). \quad (9.45)$$

Wir betrachten nun eine homogene Quelle j . In dieser translationinvarianten Situation sind die $d\nu_x$ und das mittlere Feld x -unabhängig. Setzen wir $\Gamma_{\text{MF}}[\varphi] = \Omega \Gamma_{\text{MF}}(\varphi)$, dann finden wir das *effektive Potential* in der Molekularfeldapproximation,

$$\Gamma_{\text{MF}}(\varphi) = U_{\text{MF}}(\varphi) = -d\varphi^2 + (\mathcal{L}w_0)(\varphi). \quad (9.46)$$

Man kann zeigen, dass U_{MF} die Molekularfeldapproximation für das *constraint effective potential* ist, siehe [57]. Da U_{MF} das konvexe konventionelle effektiven Potential $\Gamma(\varphi)$ nach oben beschränkt, ist seine konvexe Hülle

$$(\mathcal{L}^2 U_{\text{MF}})(\varphi) \geq \Gamma(\varphi) \quad (9.47)$$

eine noch bessere Approximation für $\Gamma(\varphi)$. Diese verbesserte Approximation heisst MAXWELL-Konstruktion.

Für die freie Theorie mit $V(\phi) = \frac{1}{2}m^2\phi^2$ ist bis auf eine additive Konstante

$$w_0(j) = \frac{1}{2} \frac{j^2}{m_d^2}, \quad (\mathcal{L}w_0)(\varphi) = \frac{1}{2} m_d^2 \varphi^2, \quad m_d^2 = m^2 + 2d,$$

und das effektive Potential ist gleich dem klassischen Potential, $U_{\text{MF}}(\varphi) = V(\varphi)$. Für die

ϕ^4 -Theorie mit Potential

$$V(\phi) = \frac{m^2}{2}\phi^2 + \frac{\lambda}{4}\phi^4 \quad (9.48)$$

ist die strikt konvexe „SCHWINGER-Funktion“

$$w_0(j) = \log \int d\phi \exp \left(j\phi - \frac{m_d^2}{2}\phi^2 - \frac{\lambda}{4}\phi^4 \right), \quad m_d^2 = m^2 + 2d. \quad (9.49)$$

Für die Lokalisierung eines Phasenübergangs im Raum der Parameter (m, λ) bestimmen wir die zweite Ableitung von $w_0(j)$ am Ursprung,

$$w_0''(0) = \frac{1}{2} \frac{m_d^2}{\lambda} \frac{K_{3/4}(z) - K_{1/2}(z)}{K_{1/4}(z)} \sim \frac{1}{m_d^2} \left(1 - \frac{3}{8z} + \frac{3}{8z^2} + \dots \right), \quad z = \frac{m_d^2}{8\lambda}. \quad (9.50)$$

Für das \mathbb{Z}_2 -symmetrische Potential (9.48) hat das ebenfalls symmetrische $w_0(j)$ seinen Minimum am Ursprung und $\varphi(j=0) = 0$. Nach (8.50) ist die Krümmung von $\mathcal{L}w_0$ am Ursprung gleich

$$(\mathcal{L}w_0)''(0) = \frac{2\lambda}{m_d^2} \frac{K_{1/4}(z)}{K_{3/4}(z) - K_{1/2}(z)} = m_d^2 \left(1 + \frac{3}{8z} - \frac{15}{64z^2} + \dots \right). \quad (9.51)$$

Deshalb ändert das Vorzeichen der Krümmung von U_{MF} in (9.46) am Ursprung für

$$2d = \frac{2\lambda}{m_d^2} \frac{K_{1/4}(z)}{K_{3/4}(z) - K_{1/2}(z)} = m_d^2 \left(1 + \frac{3}{8z} - \frac{15}{64z^2} + \dots \right). \quad (9.52)$$

Für schwach gekoppelte Systeme gilt

$$-\frac{m^2}{2d} = \frac{3}{8z} - \frac{3}{8z^2} + \dots = \frac{3\lambda}{m_d^2} \left(1 - \frac{8\lambda}{m_d^2} + \dots \right). \quad (9.53)$$

Vernachlässigen wir auf der rechten Seite Terme der Ordnung $O(\lambda^3)$, dann hat diese Gleichung die beiden Lösungen

$$\lambda_c = \frac{m_d^2}{16} \left(1 \pm \sqrt{1 + \frac{15m^2}{3d}} \right). \quad (9.54)$$

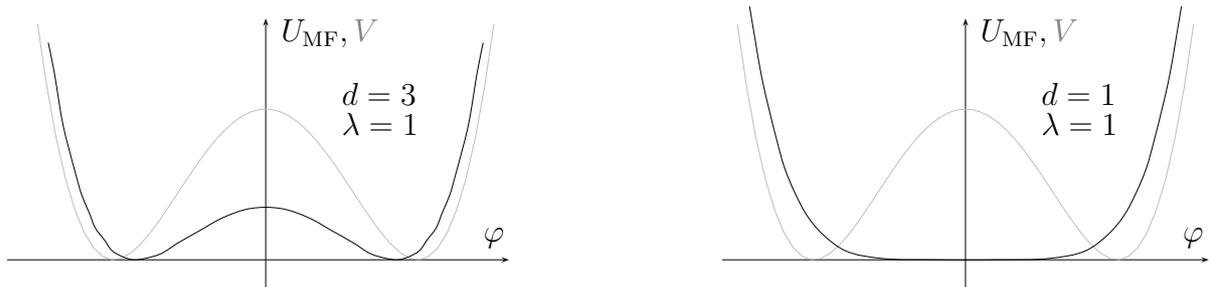
Nur für diejenige mit dem negativen Vorzeichen der Wurzel verschwindet, wie erwartet, die „kritische Masse“ für $\lambda = 0$. Wählen wir diese Lösung, dann muß der Parameter m^2 negativ sein, damit λ_c positiv ist.

In den folgenden Abbildungen sind das effektive Potential U_{MF} und das klassischen

Potential

$$V(\phi) = \lambda(\phi^2 - 1)^2, \tag{9.55}$$

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.

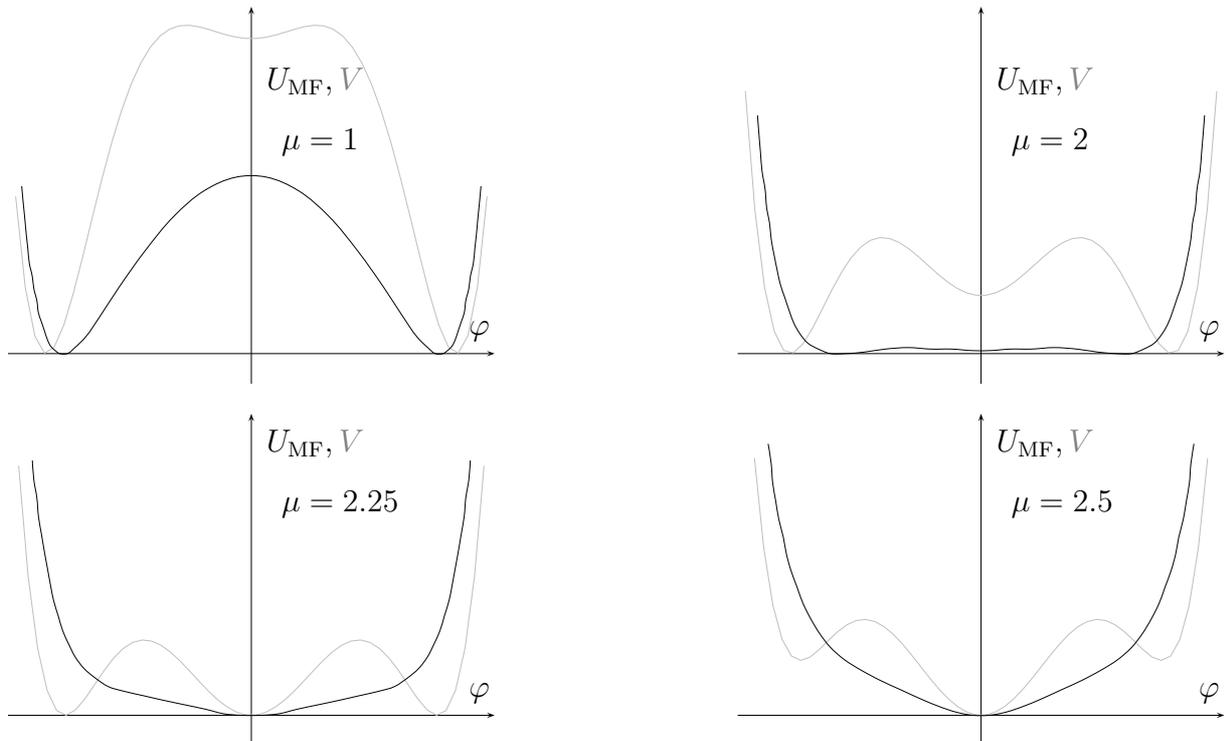


Mit zunehmender Dimension liegen die Minimas des nicht-konvexen U_{MF} näher an den Minimas des klassischen Potentials.

In den folgenden Abbildungen sind das \mathbb{Z}_2 -symmetrische klassische Potential

$$V(\phi) = \phi^6 - 3\phi^4 + \mu\phi^2 \tag{9.56}$$

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.

9.4 Kontinuumsliches für freies Feld

Wir führen nun explizit eine Gitterkonstante a ein, sie entspricht der Intervall-Länge ϵ im 2. Kapitel, und berechnen 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 (9.12)

$$G(n) = \frac{1}{(2\pi)^d} \int_{-\pi}^{\pi} d^d k \frac{e^{ikn}}{m_L^2 + \hat{k}^2}, \quad \hat{k}_\mu = 2 \sin \frac{k_\mu}{2}$$

in welcher wir $n = x/a$, $k = pa$ und $m_L = am$ setzen,

$$G(x) = \left(\frac{a}{2\pi}\right)^d \frac{1}{a^2} \int_B d^d p \frac{e^{ipx}}{m^2 + \hat{p}^2}, \quad \hat{p}_\mu = \frac{2}{a} \sin \frac{ap_\mu}{2}. \quad (9.57)$$

Die Impulsintegration erstreckt sich über die BRILLOIN-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

$$\tilde{G}_a(x) = \frac{1}{a^{d-2}} G(x) = \frac{1}{(2\pi)^d} \int_B d^d p \frac{e^{ipx}}{m^2 + \hat{p}^2}, \quad (9.58)$$

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,

$$\frac{1}{a^d} \delta_{x,0} \xrightarrow{a \rightarrow 0} \delta(x), \quad (9.59)$$

und damit strebt diese Differenzgleichung gegen die lineare Differenzialgleichung

$$(-\Delta + m^2)\tilde{G}(x) = \delta^d(x), \quad \text{wobei} \quad \lim_{a \rightarrow 0} \tilde{G}_a = \tilde{G}. \quad (9.60)$$

Es ist die Bewegungsgleichung für die Zweipunktfunktion des freien EUKLIDischen Feldes mit Masse m . Dass das Integral (9.58) für die Zweipunktfunktion \tilde{G} für $a \rightarrow 0$ gegen

$$\frac{1}{(2\pi)^d} \int_{-\infty}^{\infty} d^d p \frac{e^{ipx}}{m^2 + p^2} \quad (9.61)$$

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 k -Werte zum Integral wegen der raschen Oszillation der Exponentialfunktion nicht beitragen. Abschließend einige Bemerkungen zu unserem Ergebnis:

- Die Reskalierung (9.58) der GREENSchen Funktion entspricht einer *Feldrenormierung*. In der EUKLIDischen Wirkung auf \mathbb{Z}^d ,

$$S = \frac{1}{2} \sum_{\langle nm \rangle} (\phi(m) - \phi(n))^2 + \frac{m_L^2}{2} \sum_n \phi^2(n) \quad (9.62)$$

sind sowohl der Parameter m_L als auch das Gitterfeld ϕ dimensionslos. In der Kontinuumstheorie wird die Summe über alle Gitterpunkte zu einem Integral über \mathbb{R}^d und die Differenz $\phi(m) - \phi(n)$ zu einer Ableitung. Deshalb hat im Kontinuum ein Skalarfeld die Dimension $[\phi] = [\text{Länge}]^{-(d-2)/2}$. Ein Kontinuumsliches in der Wirkung

$$\begin{aligned} S &= \frac{1}{2} \sum_{x \in (a\mathbb{Z})^d} \frac{a^d}{a^{d-2}} \left(\sum_{\mu=1}^d \frac{(\phi(x + ae_\mu) - \phi(x))^2}{a^2} + \frac{m_L^2}{a^2} \phi^2(x) \right) \\ &\rightarrow \frac{1}{2} \int d^d x \left((\nabla \tilde{\phi}(x), \nabla \tilde{\phi}(x)) + m^2 \tilde{\phi}^2(x) \right) \end{aligned} \quad (9.63)$$

verlangt folgende Reskalierung des Feldes

$$\phi(m) \longrightarrow \tilde{\phi}(x) = \frac{1}{a^{(d-2)/2}} \phi(am). \quad (9.64)$$

Das überträgt sich auf eine Renormierung der n -Punktfunktion

$$G(m_1, \dots, m_n) \longrightarrow \tilde{G}(x_1, \dots, x_n) = a^{-n(d-2)/2} G(am_1, \dots, am_n). \quad (9.65)$$

- Für große Werte des Arguments fallen die 2-Punktfunktionen der Gittertheorie und der Kontinuumstheorie exponentiell ab,

$$G(n) \xrightarrow{m_L |n| \gg 1} e^{-m_L |n|} \quad , \quad \tilde{G}(x) \xrightarrow{m|x| \gg 1} e^{-m|x|}. \quad (9.66)$$

- 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 Kontinuumsliches. Obwohl die Gitterregularisierung die Drehinvarianz bricht, wird diese im Kontinuumsliches wieder hergestellt.

Beim Kontinuumsliches treten vier Größen auf:

1. Die dimensionslose *nackte Masse* m_L in der Gitterwirkung (9.62).
2. Die dimensionslose *Korrelationslänge* auf dem Gitter ξ_L ergibt sich aus der 2-Punktfunktion,

$$\frac{1}{\xi_L} = - \lim_{|n| \rightarrow \infty} \frac{\log G(n)}{|n|}. \quad (9.67)$$

Im Allgemeinen ist ξ_L eine Funktion von m_L und eventuell weiteren nackter Kopplungskonstanten. Für das etwas spezielle 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. Der *Gitterabstand* a ist definiert durch

$$a = \frac{1}{m \xi_L(m_L)}. \quad (9.68)$$

Durch Wahl der nackten Masse m_L ergibt sich die Korrelationslänge in Gittereinheiten, $\xi_L = \xi/a$, und diese soll die physikalische Masse beschreiben. a ist also eine Funktion der physikalischen Masse m und des vorgegebenen 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 Kontinuumsliches 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 (9.68) die zugehörige Gitterkonstante. Damit einerseits Gitterartefakte und andererseits die Endlichkeit des Gitters die Resultate nicht verfälschen, sollte bei jeder Simulation die Ungleichungen

$$1 \ll \xi_L \ll N \quad (9.69)$$

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.

9.5 Kontinuumsliches 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

$$a \longrightarrow 0 \quad , \quad T = \frac{1}{aN_d} \quad \text{fest.} \quad (9.70)$$

In der Nähe eines kritischen Punktes ist die Korrelationslänge in Gittereinheiten

$$\frac{\xi}{a} = \xi_L = \kappa(\beta_c - \beta)^{-\nu}, \quad \beta \uparrow \beta_c. \quad (9.71)$$

Legen wir die Korrelationslänge ξ fest, dann fixiert (9.71) den Gitterabstand a als Funktion des Parameters β , also $a = a(\beta)$. Der Kontinuumsliches 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

$$\langle O(n)O(m) \rangle \sim e^{-m_{OL}|n-m|} \quad (9.72)$$

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

$$m_{OL}a(\beta) = m_{OL} = \kappa_O (\beta_c - \beta)^\nu, \quad \beta \uparrow \beta_c \quad (9.73)$$

gelten. Damit strebt das Produkt $m_{OL}\xi$ gegen einen konstanten Wert in der Umgebung des kritischen Punktes,

$$m_{OL}\xi = \kappa_m \kappa. \quad (9.74)$$

Die Zahlen κ und κ_m können in Simulationen bestimmt werden. Mit ihrer Hilfe kann die Abschirmmasse m_{OL} in Einheiten des freien Parameters $1/\xi$ „gemessen“ werden.

9.6 Programme zu Kapitel 9

Das folgende `octave`-Programm `korrscalar` berechnet die Zweifunktionsfunktion (9.12) als Funktion von x , dividiert durch die massenabhängige Konstante C_m in (9.13). 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 Zweifunktionsfunktion für 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;

```

Mit dem folgende octave-Programm `mfscalar.m` wurde das effektive Potential U_{MF} in der Molekularfeldnäherung für das klassische Potential

$$V(\phi) = \lambda(\phi^2 - 1)^2 \quad (9.75)$$

berechnet. Einige Plots finden sich auf der Seite 201. 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=umf1=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_um_Potential_zu_normieren
[umin1,nmin]=min(umf);_#_Minimum_von_u
nmin=max(nmin,N+1-nmin);
umf(nmin)=umf(nmin)+.5;_#_Markierung_des_Minimums
data=[L,umf-umin1];_#_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)-umin1);
if_(rem(i,5)==0)_fprintf(mfscalar,"\n");
endif;
endfor;
fclose(mfscalar);
endfunction;

```

Kapitel 10

Spinorfelder

Elektronen, Myonen oder Quarks werden 4-komponentige Spinorfelder $\psi(x) \in \mathbb{C}^4$ zugeordnet. Das Feld beschreibt neben dem Teilchen auch sein Antiteilchen mit gleicher Masse aber entgegengesetzter Ladung. Ohne Wechselwirkung gehorcht es der DIRAC-Gleichung

$$(i\gamma^\mu \partial_\mu - m)\psi(x) = 0, \quad \{\gamma^\mu, \gamma^\nu\} = 2\eta^{\mu\nu} \mathbb{1}, \quad (10.1)$$

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 wurden in der Vorlesung Quantenmechanik II ausführlich diskutiert. Sie 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

$$\{\gamma_E^\mu, \gamma_E^\nu\} = 2\delta^{\mu\nu} \quad (10.2)$$

erfüllen, ersetzt. Da im Folgenden nur die EUKLIDische Theorie behandelt wird, lassen wir den Index E wieder weg. Die EUKLIDischen Gamma-Matrizen sind hermitesch,

$$\gamma_\mu^\dagger = \gamma_\mu = \gamma^\mu \quad (10.3)$$

und die DIRAC-Gleichung für das EUKLIDische Feld lautet

$$D\psi(x) \equiv (\not{\partial} + m)\psi(x) = 0, \quad \not{\partial} = \gamma^\mu \partial_\mu. \quad (10.4)$$

Die bekannte Beziehung $\bar{\psi} = \psi^\dagger \gamma^0$ kann nicht mehr gelten. Andernfalls wäre $\bar{\psi}\psi$ nicht invariant unter „LORENTZ-Transformationen“ im EUKLIDischen Raum. Der Operator $\not{\partial}$ ist anti-hermitesch, im Gegensatz zu m . Der DIRAC-operator D im EUKLIDischen Raum

ist zwar nicht mehr hermitesch, aber immer noch „ γ_5 -hermitesch“

$$\gamma_5 D \gamma_5 = D^\dagger. \quad (10.5)$$

Mit dieser Bedingung erscheinen alle nicht-reellen Eigenwerte von D in komplex konjugierten Paaren. Man findet den nicht-hermiteschen DIRAC-Operator auch bei einer sorgfältigen Ableitung der Pfadintegral-Darstellung für die thermische Zustandssumme [24]. Die obige DIRAC-Gleichung ist die EULER-LAGRANGE-Gleichung zur Wirkung

$$S_F = \int d^4x \left(\frac{1}{2} (\bar{\psi}(x) \gamma^\mu \partial_\mu \psi(x) - \partial_\mu \bar{\psi}(x) \gamma^\mu \psi(x)) + m \bar{\psi}(x) \psi(x) \right). \quad (10.6)$$

Bis auf einen Oberflächenterm ist diese gleich

$$S_F = \int d^4x \bar{\psi}(x) D \psi(x). \quad (10.7)$$

In dieser Form findet man die fermionische Wirkung auch in den meisten Lehrbüchern. Sie hat eine globale $U(1)$ -Invarianz,

$$\psi(x) \longrightarrow U \psi(x), \quad \bar{\psi}(x) \longrightarrow \bar{\psi}(x) U^{-1}, \quad (10.8)$$

und diese kann durch Einführung eines Eichfeldes lokal gemacht werden. Wir kommen später darauf zurück. Im chiralen Limes $m = 0$ hat sie zusätzlich eine *chirale Symmetrie*,

$$\psi(x) \longrightarrow e^{\gamma_5 \alpha} \psi(x) \quad , \quad \bar{\psi}(x) \longrightarrow \bar{\psi}(x) e^{\alpha \gamma_5}, \quad \alpha \in \mathbb{R}. \quad (10.9)$$

Hier ist γ_5 die mit allen γ^μ antivertauschende und hermitesche Matrix

$$\gamma_5 = \gamma^0 \gamma^1 \gamma^2 \gamma^3 = \gamma_5^\dagger, \quad \{\gamma_5, \gamma^\mu\} = 0. \quad (10.10)$$

Man beachte, dass im EUKLIDischen Raum die Gruppe der 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.

10.1 Grassmann Variablen

Wir kehren nochmals kurz zu den Skalarfeldern zurück. Klassische Felder sind gewöhnliche kommutierende Funktionen,

$$[\phi(x), \phi(y)] = 0, \quad (10.11)$$

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 Grenzfalls, in dem die FERMI-Felder antikommutieren,

$$\{\psi(x), \psi(y)\} = 0, \quad \forall x, y. \quad (10.12)$$

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

$$\{\eta_i, \eta_j\} = \{\bar{\eta}_i, \bar{\eta}_j\} = \{\eta_i, \bar{\eta}_j\} = 0 \quad (10.13)$$

erfüllen. Eine Integration über Grassmann Variablen hat die Eigenschaft

$$\int d\eta_i (a + b\eta_i) = b \quad (10.14)$$

für beliebige komplexe Zahlen a, b . Fermionische Felder ordnen jedem Ereignis 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

$$\{\psi_\alpha(x), \psi_\beta(y)\} = \{\bar{\psi}_\alpha(x), \bar{\psi}_\beta(y)\} = \{\psi_\alpha(x), \bar{\psi}_\beta(y)\} = 0. \quad (10.15)$$

Im fermionischen Pfadintegral wird über fermionische und anti-fermionische Feldkonfigurationen integriert. Wir schreiben kurz

$$\mathcal{D}\psi \mathcal{D}\bar{\psi} \equiv \prod_x \prod_\alpha d\psi_\alpha(x) d\bar{\psi}_\alpha(x). \quad (10.16)$$

Eine fermionische GREENfunktion ist durch ein Funktionalintegral gegeben,

$$\langle 0 | \hat{A} | 0 \rangle = \frac{1}{Z_F} \int \mathcal{D}\psi \mathcal{D}\bar{\psi} A e^{S_F}, \quad \text{mit} \quad Z_F = \int \mathcal{D}\psi \mathcal{D}\bar{\psi} e^{S_F}, \quad (10.17)$$

und Wirkung S_F für die Fermionen. Für das freie DIRAC-Feld ist

$$S_F = \int d^d x \bar{\psi}(x) D \psi(x). \quad (10.18)$$

In fast allen physikalisch interessanten Theorien ist S_F bilinear in den fermionischen Feldern¹. Mit den Regeln für GRASSMANN-Integrale kann man zeigen, dass für bilineare Wirkungen das Funktionalintegral formal einfach zu berechnen ist,

$$Z_F = \int \mathcal{D}\psi \mathcal{D}\bar{\psi} \exp \left(\int d^d x \bar{\psi}(x) D \psi(x) \right) = \det D. \quad (10.19)$$

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

$$\int \mathcal{D}\phi \mathcal{D}\bar{\phi} e^{-\int d^d x \bar{\phi}(x) A \phi(x)} = \frac{1}{\det A}. \quad (10.20)$$

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.

10.2 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 .

10.2.1 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

$$S_D(x-y) = \langle x | \frac{1}{D} | y \rangle \quad (10.21)$$

auch für sehr grosse Gitter von der gewählten Diskretisierung ab.

¹Ausnahmen sind THIRING, GROSS-NEVEU oder Supergravitations-Modelle.

Vorwärts- und Rückwärtsableitung

Die oft gebrauchten nächste-Nachbarn Vorwärts- und Rückwärtsableitungen

$$(\partial_\mu f)(x) = f(x + e_\mu) - f(x) \quad , \quad (\partial_\mu^* f)(x) = f(x) - f(x - e_\mu) \quad (10.22)$$

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

$$(f, \partial_\mu g) = -(\partial_\mu^* f, g). \quad (10.23)$$

Diese Ableitungen definieren zirkuläre Operatoren und vertauschen miteinander,

$$[\partial_\mu, \partial_\nu] = [\partial_\mu^*, \partial_\nu^*] = [\partial_\mu, \partial_\nu^*] = 0. \quad (10.24)$$

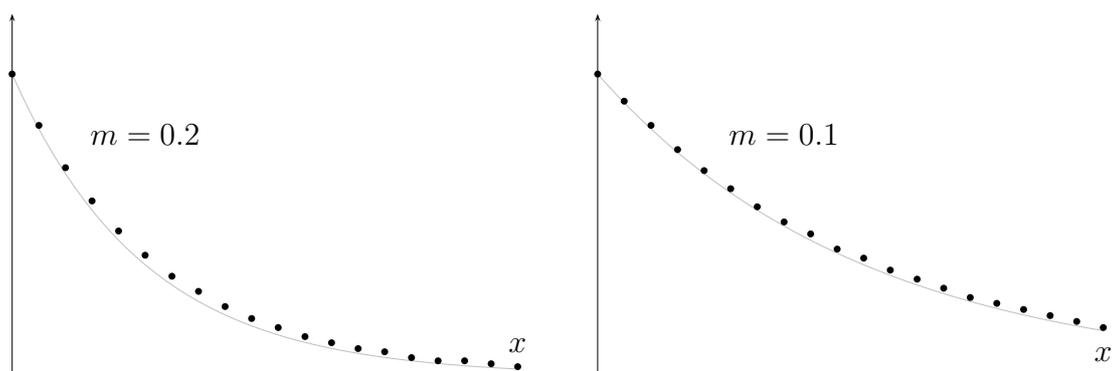
Die φ_p in (9.8) sind gleichzeitig Eigenfunktionen aller Ableitungsoperatoren,

$$\partial_\mu \varphi_p = i\hat{p}_\mu e^{ip_\mu/2} \varphi_p \quad \text{und} \quad \partial_\mu^* \varphi_p = i\hat{p}_\mu e^{-ip_\mu/2} \varphi_p, \quad \hat{p}_\mu = 2 \sin \frac{p_\mu}{2}. \quad (10.25)$$

Deshalb hat die Greenfunktion von $\partial + m$ auf dem *eindimensionalen* Gitter die Form

$$\langle x | \frac{1}{\partial + m} | 0 \rangle = \frac{1}{N} \sum_p \frac{e^{ipx}}{m + ie^{ip/2}\hat{p}} \xrightarrow{N \rightarrow \infty} \frac{1}{2\pi} \int_{-\pi}^{\pi} dp \frac{e^{ipx}}{m + ie^{ip/2}\hat{p}}. \quad (10.26)$$

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,

$$\partial_\mu^A = \frac{1}{2} (\partial_\mu + \partial_\mu^*) \implies (\partial_\mu^A f)(x) = \frac{1}{2} (f(x + e_\mu) - f(x - e_\mu)). \quad (10.27)$$

Diese *naive Gitterableitung* ist antisymmetrisch und ihre Komponenten kommutieren,

$$(f, \partial_\mu^A g) = -(\partial_\mu^A f, g) \quad \text{und} \quad [\partial_\mu^A, \partial_\nu^A] = 0. \quad (10.28)$$

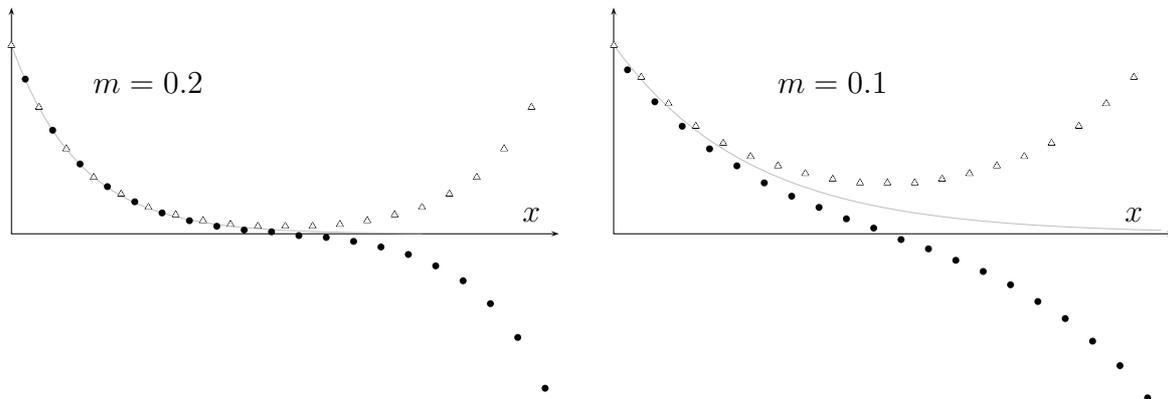
Sie können gleichzeitig diagonalisiert werden und die ebenen Wellen φ_p auf Seite 192 sind ihre Eigenfunktionen,

$$\partial_\mu^A \varphi_p(x) = i\mathring{p}_\mu \varphi_p(x), \quad \mathring{p}_\mu = \sin p_\mu \quad p_\mu = \frac{2\pi}{N} n_\mu, \quad n_\mu \in \mathbb{Z}_N. \quad (10.29)$$

Auf dem eindimensionalen Gitter findet man die Greenfunktion

$$\langle x | \frac{1}{\partial^A + m} | 0 \rangle = \frac{1}{N} \sum_p \frac{e^{ipx}}{m + i\mathring{p}} \xrightarrow{N \rightarrow \infty} \frac{1}{2\pi} \int_{-\pi}^{\pi} \frac{e^{ipx}}{m + i\mathring{p}} \quad (10.30)$$

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 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

$$x_k = x_0 + k, \quad k = 1, \dots, N, \quad (10.31)$$

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,

$$(\phi, \psi) = \sum_{k=1}^N \bar{\phi}_k \psi_k, \quad (10.32)$$

definieren den HILBERT-Raum \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

$$\langle \hat{x} \rangle_\psi = \langle \bar{\psi} | \hat{x} | \psi \rangle = \sum x_k |\psi_k|^2 \equiv \sum_{kk'} \bar{\psi}_k x_{kk'} \psi_{k'}. \quad (10.33)$$

Wie erwartet ist der Ortsoperator in der Ortsdarstellung diagonal,

$$x_{kk'} = x_k \delta_{kk'}, \quad (10.34)$$

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

$$\tilde{\psi}_\ell = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{k=1}^N e^{-ip_\ell x_k} \psi_k, \quad p_\ell = \frac{2\pi}{N} (\ell - \alpha), \quad \ell = 1, 2, \dots, \quad \alpha \in \mathbb{Z}. \quad (10.35)$$

Die Verschiebung α wird später so gewählt, dass die Eigenwerte des Impulsoperators in Paaren $(p, -p)$ auftreten. Allerdings muss α eine ganze Zahl sein, damit die Exponentialfunktionen (10.35) periodisch sind. Die Rücktransformation lautet

$$\psi_k = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\ell=1}^N e^{ip_\ell x_k} \tilde{\psi}_\ell, \quad k = 1, 2, \dots, N. \quad (10.36)$$

²Wir folgen hier teilweise der Vorlesung *Computational Physics I* von U. Wolf.

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 $f(p)$

$$\begin{aligned}\langle f(\hat{p}) \rangle_\psi &= \sum_\ell f(p_\ell) |\tilde{\psi}_\ell|^2 = \frac{1}{N} \sum_\ell \sum_{kk'} e^{ip_\ell(x_k - x_{k'})} f(p_\ell) \bar{\psi}_k \psi_{k'} \\ &= \sum_{kk'} \bar{\psi}_k f(p)_{kk'} \psi_{k'}, \quad f(p)_{kk'} = \frac{1}{N} \sum_\ell e^{ip_\ell(x_k - x_{k'})} f(p_\ell).\end{aligned}\quad (10.37)$$

Wie erwartet hat der Operator $f(p)$ in der Ortsdarstellung nicht-diagonale Matrixelemente $f(p)_{kk'}$. Mit Hilfe der erzeugenden Funktion

$$Z(x) = \frac{1}{N} \sum_{\ell=1}^N e^{iNp_\ell x} = e^{i\pi\beta x} \frac{\sin \pi N x}{N \sin \pi x}, \quad \beta = 1 + N - 2\alpha, \quad (10.38)$$

erhält man die Matrixelemente von $f(\hat{p})$ durch Ableiten nach x ,

$$f(p)_{kk'} = f\left(\frac{1}{iN} \frac{d}{dx}\right) Z(x) \Big|_{x=(k-k')/N} \quad (10.39)$$

Man findet für den Impulsoperator

$$p_{kk} = \frac{\pi\beta}{N}, \quad p_{k \neq k'} = \frac{\pi}{iN} (-)^{k-k'} \frac{e^{i\beta t_{kk'}}}{\sin t_{kk'}}, \quad t_{kk'} = \pi \frac{(k-k')}{N}. \quad (10.40)$$

Wählen wir $\alpha = 1 + N$, dann verschwindet β und das Impulsspektrum liegt symmetrisch zum Ursprung. Für eine ungerade Anzahl Gitterpunkte entspricht dies periodischen und für ein gerade Anzahl Gitterpunkten antiperiodischen Randbedingungen. Die Matrixelemente des Impulsoperators sind reell und haben die einfache Form

$$p_{kk} = 0, \quad p_{k \neq k'} = \frac{\pi}{iN} (-)^{k-k'} \frac{1}{\sin t_{kk'}}, \quad (10.41)$$

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

$$p_{kk} = \frac{\pi}{N}, \quad p_{k \neq k'} = \frac{\pi}{iN} (-)^{k-k'} \frac{e^{it_{kk'}}}{\sin t_{kk'}}. \quad (10.42)$$

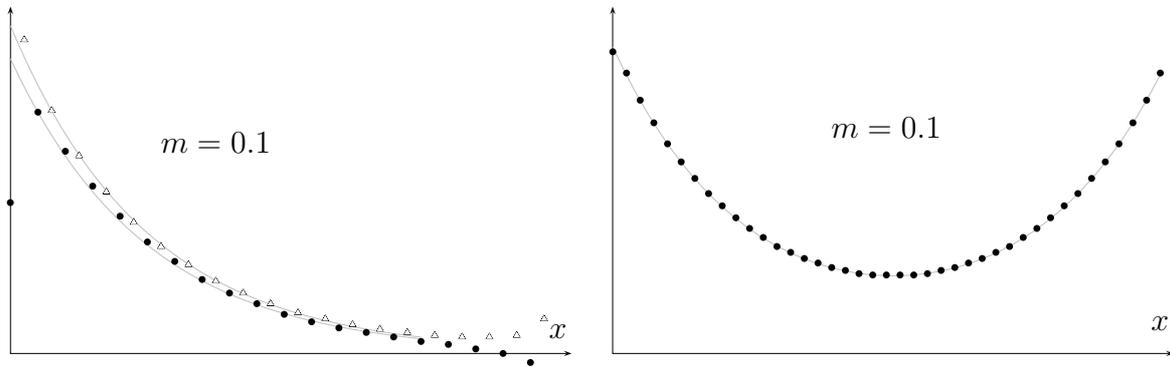
In der folgenden Abbildung sind die Greenfunktionen

$$\langle x | \frac{1}{m + \partial_{\text{slac}}} | 0 \rangle \quad \text{und} \quad \langle x | \frac{1}{m^2 - \partial_{\text{slac}}^2} | 0 \rangle, \quad (\partial_{\text{slac}})_{kk'} = ip_{kk'}, \quad (10.43)$$

geplottet. Wir beobachten das bekannte GIBBS-Phänomen, dass bei 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.



10.2.2 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 (10.6) durch die Vorwärts- oder Rückwärtsableitung auf dem Gitter, dann finden wir folgende Wirkung für DIRAC-Spinoren auf dem endlichen Raumzeitgitter,

$$S_{n,F} = \sum_x \bar{\psi}(x) (\mathring{D}\psi)(x), \quad \mathring{D} = \gamma^\mu \partial_\mu^A + m. \quad (10.44)$$

Mit der antisymmetrischen Ableitung (10.27) hat man allerdings ein Verdopplungsproblem. Um dies einzusehen, berechnen wir das Spektrum und die Eigenfunktionen von $\gamma^\mu \partial_\mu^A$ und die Zweipunktfunktion

$$\langle \psi(x) \bar{\psi}(y) \rangle = S(x, y) = \langle x | \frac{1}{\mathring{D}} | y \rangle. \quad (10.45)$$

Der nicht-negative LAPLACE-Operator $\mathring{\Delta} = \partial_\mu^A \partial_\mu^A$ in

$$\mathring{D} \mathring{D}^\dagger = (\gamma^\mu \partial_\mu^A + m)(-\gamma^\mu \partial_\mu^A + m) = \left(-\mathring{\Delta} + m^2 \right) \mathbb{1} \quad (10.46)$$

verbindet nur übernächste Nachbarn,

$$(\overset{\circ}{\Delta}f)(x) = \frac{1}{4} \sum_{\mu} (f(x + 2e_{\mu}) - 2f(x) + f(x - 2e_{\mu})). \quad (10.47)$$

und hat die Eigenwerte

$$\overset{\circ}{p}^2 \quad \text{mit} \quad \overset{\circ}{p}_{\mu} = \sin(p_{\mu}). \quad (10.48)$$

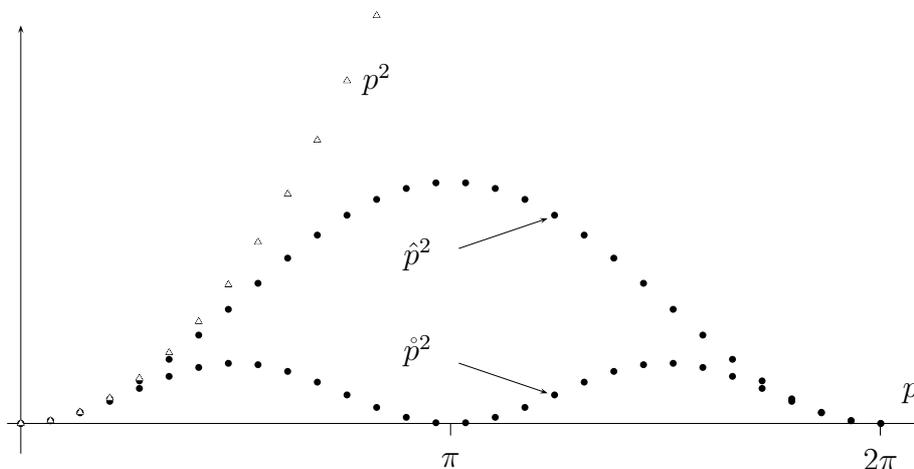
Genau diese Eigenschaft ist aber für das *Verdopplungsproblem* verantwortlich. Um dies zu sehen, sollte man mit der üblichen Diskretisierung des LAPLACE-Operators,

$$(\Delta f)(x) = (\partial_{\mu}^* \partial_{\mu} f)(x) = \sum_{\mu} (f(x + e_{\mu}) - 2f(x) + f(x - e_{\mu})), \quad (10.49)$$

die nur nächste Nachbarn verbindet, vergleichen. Der Operator $-\Delta$ hat die Eigenwerte

$$\hat{p}^2 \quad \text{mit} \quad \hat{p}_{\mu} = 2 \sin\left(\frac{p_{\mu}}{2}\right). \quad (10.50)$$

In der folgenden Abbildung werden die Dispersionsrelationen (10.48,10.50) 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

$\mathring{\Delta}$ für gerades N genau 2^d Nullmoden. Diese haben die Form (9.8) mit

$$p = (p_1, \dots, p_d) \quad \text{und} \quad p_\mu \in \{0, \pi\}. \quad (10.51)$$

Für ungerades N gibt es streng genommen nur eine Nullmode. Aber im thermodynamischen Limes hat die Dispersionsrelation (10.48) 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

$$\mathring{\lambda}_p = m + i|\mathring{p}| \quad \text{und} \quad \mathring{\lambda}_p = m - i|\mathring{p}|. \quad (10.52)$$

Sind $\chi^{(1)}, \dots, \chi^{(4)}$ konstante Elemente im \mathbb{C}^4 , dann haben diese (unnormierten) Eigenfunktionen die Form

$$\psi_p^{(\alpha)} = (i|\mathring{p}| \pm \gamma^\mu \mathring{\partial}_\mu^A) \varphi_p(x) \chi^{(\alpha)} = i(|\mathring{p}| \pm \gamma^\mu \mathring{p}_\mu) \varphi_p(x) \chi^{(\alpha)}. \quad (10.53)$$

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 (10.44) haben alle den gleichen Realteil,

$$\sigma(\mathring{D}) = \{m \pm i|\mathring{p}|\}. \quad (10.54)$$

Die Greenfunktion von $\mathring{D}\mathring{D}^\dagger$ hat die endliche Reihendarstellung

$$\langle x | \frac{1}{\mathring{D}\mathring{D}^\dagger} | y \rangle = \frac{\mathbb{1}_4}{V} \sum_p \frac{e^{ip(x-y)}}{\mathring{p}^2 + m^2}, \quad (10.55)$$

und entsprechend lautet die Zweipunktfunktion (10.45)

$$\langle x | \frac{1}{\mathring{D}} | y \rangle = \mathring{D}^\dagger \langle x | \frac{1}{\mathring{D}\mathring{D}^\dagger} | y \rangle = \frac{1}{V} \sum_p \frac{-i\gamma^\mu \mathring{p}_\mu + m}{\mathring{p}^2 + m^2} e^{ip(x-y)}. \quad (10.56)$$

Im thermodynamischen Limes wird die Summe über p zu einem RIEMANN-Integral über die erste BRILLOIN-Zone,

$$\langle x | \frac{1}{\mathring{D}} | y \rangle = \frac{1}{(2\pi)^d} \int_B d^4 p \frac{\gamma^\mu \mathring{p}_\mu + m}{\mathring{p}^2 + m^2} e^{ip(x-y)} \quad (10.57)$$

Die naive Diskretisierung der Kontinuumstheorie führt zu einer Gittertheorie mit überzähligen Freiheitsgraden bei niedrigen Energien.

Eine zweite naive Diskretisierung beruht auf der Vorwärtsableitung

$$\hat{D} = \gamma^\mu \partial_\mu + m. \quad (10.58)$$

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.

10.2.3 Wilson-Fermionen

Es gibt mehrere Auswege, diese Verdopplung der Fermionen zu verhindern. Die Vorschläge in [58] vermeiden die Verdopplung, verletzen aber die chirale Symmetrie für masselose Fermionen. Die auf der Slac-Ableitung beruhende Methode in [60] vermeidet ebenfalls das Verdopplungsproblem und respektiert darüberhinaus die chirale Symmetrie. Sie hat für Fermionen, die an ein Eichfeld koppeln, allerdings Probleme mit den WARD-Identitäten im schwachen Kopplungslimes und für kleine Gitterkonstanten [61].

Das Verdopplungsproblem war WILSON bereits in den Anfangsjahren der Gittereichtheorien bekannt. Er schlug eine modifizierte Wirkung für Fermionen vor, um die Verdopplung im Kontinuumsimes loszuwerden. Er addierte einen Term³ zur naiven Wirkung

$$S_{w,F} = S_{n,F} - \frac{r}{2} \sum_x \bar{\psi}(x)(a\Delta\psi)(x) = \sum_x \bar{\psi}(x) (D_w\psi)(x), \quad (10.59)$$

wobei der WILSON-Parameter r in

$$D_w = \overset{\circ}{D} - \frac{ar}{2} \Delta \quad (10.60)$$

im Intervall $(0, 1]$ liegt. Der Operator D_w ist *normal*, $[D_w, D_w^\dagger] = 0$ und hat die Eigenwerte

$$\lambda_{w,p} = \left(m + \frac{ar}{2} \hat{p}^2 \right) \pm i|\hat{p}| \quad \text{mit} \quad \hat{p}_\mu = \frac{2}{a} \sin\left(\frac{ap_\mu}{2}\right), \quad \overset{\circ}{p}_\mu = \frac{1}{a} \sin(ap_\mu) \quad (10.61)$$

Dabei treten jeweils beide Vorzeichen beim Wurzel ziehen auf. Wir nehmen vorerst an, die Gitterkonstante sei $a = 1$.

Um die Lage der Eigenwerte in der komplexen Ebene zu berechnen, setzen wir

$$t_i = -\cos p_i \in [-1, 1]. \quad (10.62)$$

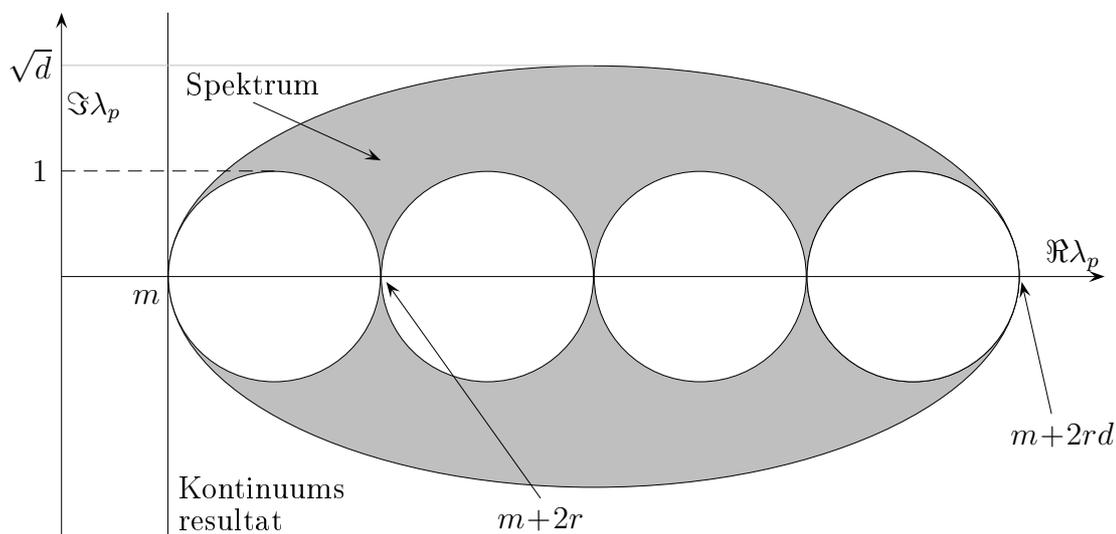
³Er wird heute WILSON-Term genannt.

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

$$(m + r, 0), (m + 3r, 0), \dots, (m + 2d - 1, 0) \tag{10.63}$$

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 $N = \infty$.

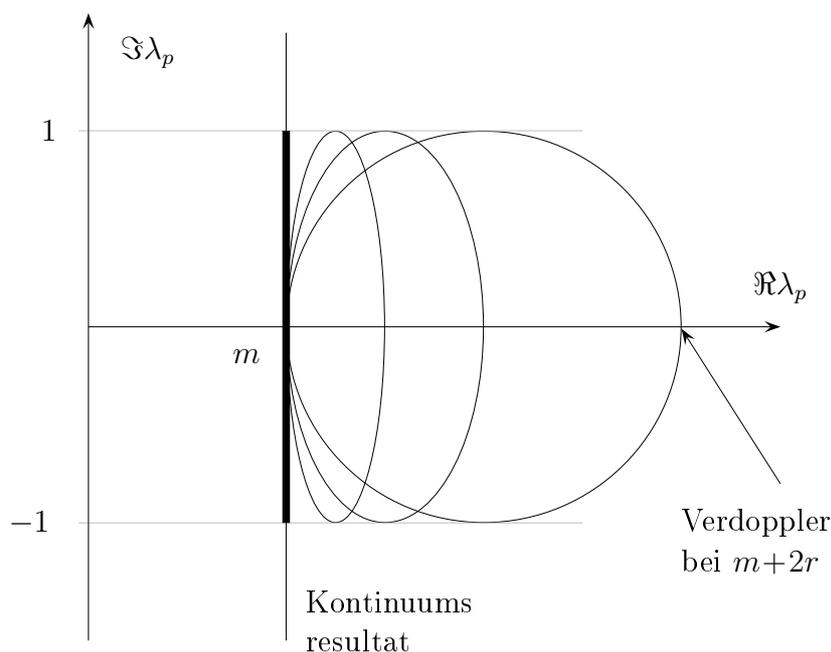


Für $r \rightarrow 0$ geht die Menge der Eigenwerte (das graue Gebiet) über in die Gerade mit Realteil m , also in das Spektrum des Kontinuum-Operators im thermodynamischen Grenzfall. Für $m = 0$ und $r \rightarrow 0$ streben die Eigenwerte bei $0, 2r, 4r, \dots$ alle gegen den Eigenwert Null und wir 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 mit den Halbachsen r und 1 ,

$$\lambda(t) = m + r(1 + t) \pm i\sqrt{1 - t^2}, \quad t \in [-1, 1]. \tag{10.64}$$

Für $r = 1$ findet man den Rückwärtsableitung, für $r = -1$ die Vorwärtsableitung und für $r = 0$ die antisymmetrische Gitterableitung. Für $r \rightarrow 0$ 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 (10.60) wie eine impulsabhängige Masse. Selbst im chiralen Limes $m = 0$ anti-vertauscht D_w nicht mit γ_5 . Die *Chiralität* wird durch den WILSON-Term explizit *gebrochen*. Für das freie DIRAC-Feld erwartet man zurecht, dass diese Symmetrie im Kontinuums-limes wieder hergestellt wird.

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 (10.61) definierten Gitterfunktionen. Die Eigenwerte von D_w sind dann

$$\lambda_{w,p} = m + \frac{ar}{2} \hat{p}^2 \pm i|\hat{p}| = m \pm i|p| + \frac{1}{2} ar p^2 + O(a^2). \quad (10.65)$$

Das Spektrum liegt 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

$$x_{0k} = m + \frac{1}{a} rk \quad \text{und} \quad (A, B) = \frac{1}{a} (r, 1), \quad k = 1, \dots, d$$

und geht für $a \rightarrow 0$ wie erwartet ins Kontinuumspektrum über.

10.3 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 sie chiral Symmetrie. Eine bilineare Wirkung für Spin- $\frac{1}{2}$ Fermionen hat die Form

$$S = \sum_{x,y} \bar{\psi}(x) M(x,y) \psi(y), \quad (10.66)$$

wobei wegen der Translationsinvarianz der DIRAC-Operator nur von $x - y$ abhängt,

$$M(x,y) = D(x - y), \quad (10.67)$$

Es stellt sich 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 [62]. 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:* $D(x - y) \sim e^{-\gamma|x-y|}$,
- *Kontinuumsliches:* $\lim_{a \rightarrow 0} \tilde{D}(p) = \sum_{\mu} \gamma^{\mu} p_{\mu}$,
- *Keine Verdoppler:* $\tilde{D}(p)$ ist invertierbar für $p \neq 0$,
- *Chiral:* $\{\gamma_*, D\} = 0$.

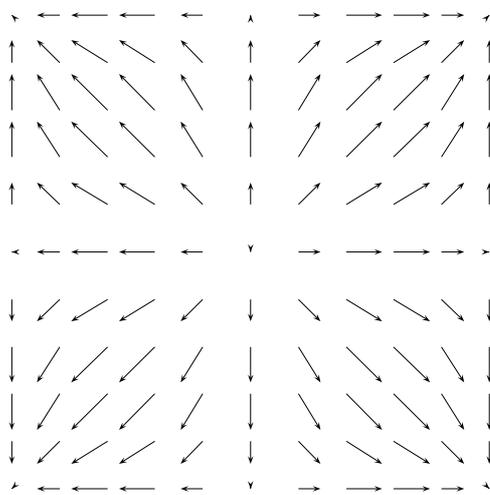
Die Lokalität bedeutet, dass die FOURIER-Transformierte \tilde{D} von D eine analytische und periodische Funktion der Impulse p_{μ} mit Periode $2\pi/a$ ist. Die zweite und dritte Forderung sorgen dafür, dass D den korrekten Kontinuumsliches hat.

In [62] wurde das Theorem mit Argumenten aus der Homotopietheorie und Differentialtopologie bewiesen. Ein eleganter differentialgeometrischer Beweis findet sich in [63]. Wir beweisen das Theorem unter der zusätzlichen und vereinfachenden Annahme [64], dass im Impulsraum

$$\tilde{D}(p) = \sum \gamma^{\mu} \tilde{D}_{\mu}(p) \quad \text{mit} \quad D_{\mu}(p) \in \mathbb{R}. \quad (10.68)$$

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 (10.68) auch den Operator $\frac{1}{2}\gamma^\mu(1 + \gamma_*)\tilde{D}_\mu$ für Fermionen mit Chiralität $+1$, zum Beispiel Neutrinos, wählen können [64].



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 $\mathbf{p} = (0, 0)$ und (π, π) hat \tilde{D} den Index 1 und an den Nullstellen $\mathbf{p} = (0, \pi)$ 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 Verdoppler 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 $\tilde{D}_\mu(p) = A_{\mu\nu} p_\nu + O(p^2)$. Für $A = \text{diag}(1, 1, 1, 1)$ ist der Index 1 und in der Umgebung der Nullstelle ist

$$\bar{\psi} \gamma^\mu \tilde{D}_\mu(p) \psi = \bar{\psi} \gamma^\mu p_\mu \psi. \tag{10.69}$$

Das DIRAC-Feld ψ transformiert unter einer chiralen Transformation in $\exp(\alpha \gamma_*) \psi$. 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

$$\bar{\psi} \gamma^\mu \tilde{D}_\mu(p) \psi = \bar{\psi} \gamma_* \gamma^0 (\gamma^\mu p_\mu) \gamma^0 \gamma_* \psi. \tag{10.70}$$

Jetzt interpretieren wir $\chi = \gamma^0 \gamma_* \psi$ als DIRAC-Feld, und dieses Feld transformiert unter

chiralen Transformationen in $\exp(-\alpha\gamma_*)\chi$, also mit der zu ψ entgegengesetzten Chiralität. Jedem Pol des masselosen Propagators entspricht ein fermionischer Einteilchenzustand. 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.

10.4 Ginsparg-Wilson Relation

Als Konsequenz des NIELSEN-NINOMIYA-Theorems scheint es unmöglich, einen chiral invarianten DIRAC-Operator zu konstruieren. In einer erst in der letzten Jahren vielbeachteten Arbeit im Jahre 1982 untersuchten GINSPARG und WILSON, wie nahe man auf dem Gitter einem chiralen DIRAC-Operator kommen kann [65]. 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

$$\psi(x) = \int d^d y \alpha(x-y)\phi(y), \quad x \in \mathbb{R}^d, \quad x \in \Lambda \quad (10.71)$$

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

$$\gamma_5 D + D \gamma_5 = a D \gamma_5 D \quad (10.72)$$

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 $\gamma_5 D + D \gamma_5$ übergeht.

Wir multiplizieren die Relation (10.72) von beiden Seiten mit $S = D^{-1}$ und finden

$$S \gamma_5 + S \gamma_5 = a \gamma_5 \implies S(x, y) \gamma_5 + S(x, y) \gamma_5 = a \gamma_5 \delta^d(x - y). \quad (10.73)$$

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

$$S_F = a^d \sum_x \bar{\psi}(x) D(x - y) \psi(y) \quad (10.74)$$

für jeden DIRAC-Operator, der die GINSPARG-WILSON-Relation (10.72) erfüllt, ein kontinuierliche Symmetrie hat, die als Gitterversion der chiralen Symmetrie interpretiert wird [66]. Diese deformierte chirale Symmetrie hat die Form

$$\psi \longrightarrow \psi_\alpha = e^{\alpha\gamma_*(1-\frac{a}{2}D)} \psi \quad \text{und} \quad \bar{\psi} \longrightarrow \bar{\psi}_\alpha = \bar{\psi} e^{\alpha(1-\frac{1}{2}aD)\gamma_*}. \quad (10.75)$$

Wir beweisen, dass $\bar{\psi}_\alpha D\psi_\alpha$ unabhängig von α ist,

$$\frac{d}{d\alpha} (\bar{\psi}_\alpha D\psi_\alpha) = \bar{\psi}_\alpha \left\{ (1 - \frac{1}{2}aD)\gamma_* D + D\gamma_*(1 - \frac{1}{2}aD) \right\} \psi_\alpha \stackrel{(10.72)}{=} 0.$$

Allerdings ist das fermionische Integrationsmass $\mathcal{D}\psi\mathcal{D}\bar{\psi}$ ist im Allgemeinen nicht invariant unter der Transformation (10.75). Diese Eigenschaft sorgt dafür, dass in Anwesenheit von äusseren Eichfeldern die korrekt 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* [67],
- *Überlapp-Operatoren (overlap-operators)* [68, 71],
- *Fixpunkt-Operatoren* [69],
- *Chiral-verbesserte Operatoren* [70].

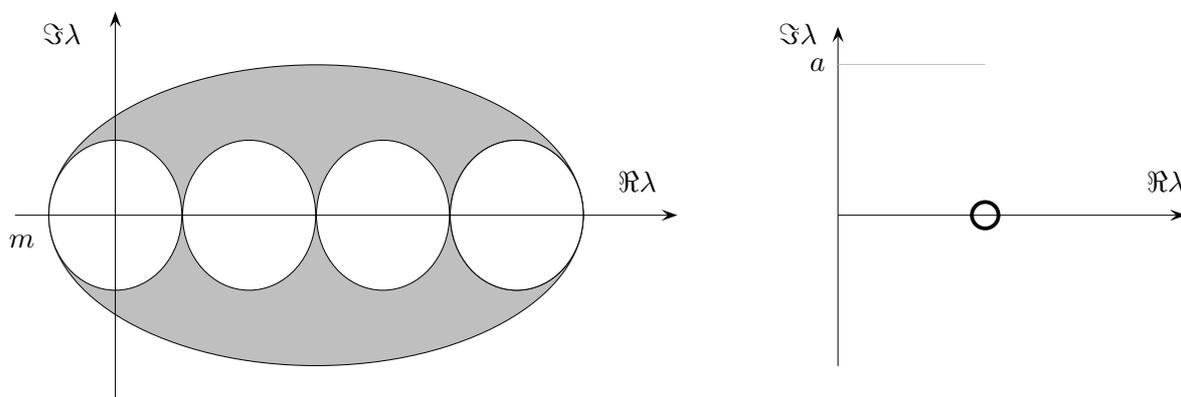
Für drei dieser Vorschläge verweise ich auf die angegebene Literatur. Im Folgenden besprechen wir die Überlapp-Operatoren. Deren Konstruktion geht auf NEUBERGER und NARAYANAN zurück.

Überlapp-Fermionen

Ein erster Operator der die GINSPARG-WILSON-Bedingung erfüllt, wurde in [68, 71] vorgestellt. Dieser sogenannte „Überlapp-Operator“ hat die Form

$$D_o = \frac{1}{a}(\mathbb{1} + V) \quad \text{mit} \quad V = (D_w D_w^\dagger)^{-1/2} D_w, \quad m < 0, \quad (10.76)$$

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 (10.72) ist

$$D\gamma_5 + \gamma_5 D = 2\gamma_5 + \{\gamma_5, V\}.$$

Um die rechte Seite umzuformen, macht man Gebrauch von

$$[D_w, D_w^\dagger] = 0 \quad \text{und} \quad \gamma_5 D_w = D_w^\dagger \gamma_5 \quad \text{und} \quad [D_w D_w^\dagger, \gamma_5] = 0, \quad (10.77)$$

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

$$D_w D_w^\dagger = -\hat{\Delta} + \left(m - \frac{ar}{2}\hat{\Delta}\right)^2 \quad (10.78)$$

hat der Überlapp-Operator im Impulsraum die Form

$$a\tilde{D}(p) = 1 + \left\{i\gamma^\mu \hat{p}_\mu + m + \frac{ar}{2}\hat{p}^2\right\} \left\{\hat{p}^2 + \left(m + \frac{ar}{2}\hat{p}^2\right)^2\right\}^{-1/2}. \quad (10.79)$$

Er erfüllt die ersten drei Bedingungen im Satz von NIELSEN und NINOMIYA. Insbesondere ist $\tilde{D}(p)$ analytisch und deshalb verschwindet $D(x - y)$ exponentiell für grosse 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.

10.4.1 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

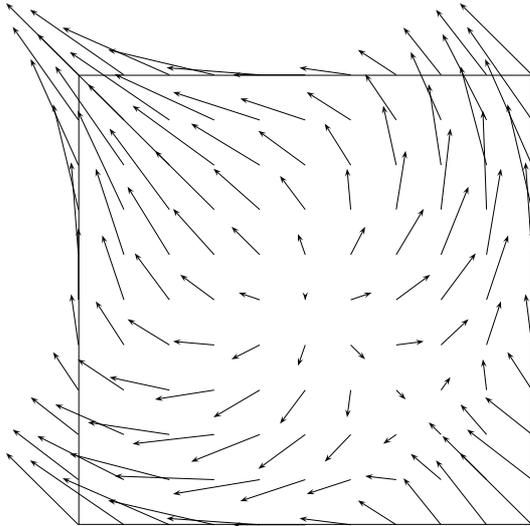
$$D = \gamma^\mu (P_+ \partial_\mu + P_- \partial_\mu^*) + m = \mathring{D} + \gamma_* \gamma^\mu \partial_\mu^S, \quad \partial_\mu^S = \frac{1}{2} (\partial_\mu^* - \partial_\mu) \quad (10.80)$$

definieren. Im chiralen Limes $m \rightarrow 0$ ist D anti-hermitesch und antikommutiert mit γ_* . Im Impulsraum hat er die Form

$$\tilde{D}(p) = i\gamma^\mu \hat{p}_\mu + m + \frac{1}{2} \gamma_* \gamma^\mu \hat{p}_\mu^2. \quad (10.81)$$

Sein „Betragsquadrat“ vereinfacht sich zu

$$\tilde{D}\tilde{D}^\dagger = \hat{p}^2 + m^2 - i\gamma_* \gamma^{\mu\nu} \hat{p}_\mu \hat{p}_\nu \sin\left(\frac{p_\mu - p_\nu}{2}\right). \quad (10.82)$$



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 zwei-

dimensionalen Operators,

$$\tilde{D}\tilde{D}^\dagger = \hat{p}^2 + m^2 + 2\hat{p}_0\hat{p}_1 \sin\left(\frac{p_0 - p_1}{2}\right). \quad (10.83)$$

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 BRILLOIN-Zone, 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 (10.83). In zwei Dimensionen wird diese Symmetrie erzeugt durch

$$\mathbf{p} \longrightarrow i\sigma_2\mathbf{p}. \quad (10.84)$$

10.5 Programme zu Kapitel 10

Das folgende octave-Programm `derinverse` berechnet die Zweifunktfunction (10.26) als Funktion von x . Sie ist für $x = 1$ auf 1 normiert. Abgefragt wird die Masse. Das Resultat und der exponentiellen 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*pa'+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-pa*pa;
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)
#gplot [0:40] data,exp(-m*(x-1))*prop(2);
gplot [0:40] data,exp(-m*x);
#,prop(N/2)-1+cosh(m*(N/2-x));
else
gplot [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{->}{%4.2f,%4.2f}
(%4.2f,%4.2f)\n",x(i),y(i),x(i)+vx(i),y(i)+vy(i));
endifor;
fclose(vectorfield);
endfunction;
```

Kapitel 11

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.

11.1 Eichtheorien im Kontinuum

Um das erfolgreiche Eichprinzip zu illustrieren, betrachten wir eine komplexes, einkomponentiges Skalarfeld mit klassischer LAGRANGEDichte

$$\mathcal{L} = \partial_\mu \phi^\dagger \partial^\mu \phi - \left(\frac{mc}{\hbar}\right)^2 \phi^\dagger \phi, \quad (11.1)$$

und Bewegungsgleichung

$$\left(\square + \frac{m^2 c^2}{\hbar^2} \right) \phi = 0. \quad (11.2)$$

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

$$\phi(x) \longrightarrow \phi'(x) = \Omega \phi(x), \quad \Omega = e^{ie\lambda} \in U(1). \quad (11.3)$$

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,

$$\phi(x) \longrightarrow \phi'(x) = \Omega(x)\phi(x), \quad \Omega(x) = e^{ie\lambda(x)} \in U(1), \quad (11.4)$$

da die Ableitungen in (11.1) und (11.2) 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*

$$D_\mu(A) = \partial_\mu - ieA_\mu \quad (11.5)$$

ersetzt wird. Im Gegensatz zu $\partial_\mu \phi$ soll $D_\mu(A)\phi$ genauso transformieren wie ϕ ,

$$D_\mu(A')\phi'(x) = \Omega(x) D_\mu(A)\phi(x) \quad \text{bzw.} \quad D_\mu(A') = \Omega D_\mu(A)\Omega^{-1}, \quad (11.6)$$

und diese Forderung impliziert folgende Transformation des Potentials

$$A'_\mu = \Omega A_\mu \Omega^{-1} - \frac{i}{e} \partial_\mu \Omega \Omega^{-1} = \Omega \left(A_\mu + \frac{i}{e} \partial_\mu \right) \Omega^{-1} \stackrel{(11.3)}{=} A_\mu + \partial_\mu \lambda. \quad (11.7)$$

Aus dem *Eichpotential* A_μ berechnet sich der (eich)invariante und antisymmetrische *Feldstärketensor*,

$$F_{\mu\nu}(A) = \frac{i}{e} [D_\mu(A), D_\nu(A)] = \partial_\mu A_\nu - \partial_\nu A_\mu = F_{\mu\nu}(A'), \quad (11.8)$$

dessen Quadrat in die *eichinvariante* LAGRANGEDichte für das System aus wechselwir-

kenden Photonen- und geladenen Spin-0 Teilchen eingeht,

$$\mathcal{L}(\phi, A_\mu) = -\frac{1}{4}F_{\mu\nu}F^{\mu\nu} + (D_\mu\phi)^\dagger D^\mu\phi - m^2\phi^\dagger\phi = \mathcal{L}(\phi', A'_\mu). \quad (11.9)$$

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

$$\phi = \begin{pmatrix} \phi_1 \\ \phi_2 \\ \vdots \\ \phi_n \end{pmatrix}, \quad \phi^\dagger = (\bar{\phi}_1, \bar{\phi}_2, \dots, \bar{\phi}_n). \quad (11.10)$$

Die reelle LAGRANGEfunktion für das freie Feld ist die Verallgemeinerung von (11.1) auf V -wertige Felder,

$$\mathcal{L} = (\partial_\mu\phi, \partial^\mu\phi) - m(\phi, \phi), \quad (11.11)$$

wobei $(.,.)$ das Skalarprodukt in V bezeichnet. Jede Komponente von $\phi(x)$ erfüllt dann die

KLEIN-GORDON Gleichung (11.2).

Das Feld transformiere nach einer irreduziblen Darstellung R einer noch nicht weiter spezifizierten halbeinfachen kompakten Gruppe \mathcal{G} ,

$$\phi(x) \longrightarrow R(\Omega)\phi(x), \quad \Omega \in \mathcal{G}. \quad (11.12)$$

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

$$\phi(x) \longrightarrow \phi'(x) = R(\Omega(x))\phi(x) \quad (11.13)$$

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

$$\partial_\mu \longrightarrow D_\mu\phi = \partial_\mu\phi - ieA_\mu\phi, \quad (11.14)$$

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 (11.6) impliziert das folgende Transformationsverhalten für das Eichpotential.

$$A_\mu \longrightarrow A'_\mu = \Omega A_\mu \Omega^{-1} - \frac{i}{e} \partial_\mu \Omega \Omega^{-1}. \quad (11.15)$$

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 (11.15) in dieser Algebra und Eichtransformationen wirken im Raum der \mathfrak{g} -wertigen Eichpotentiale. Die \mathfrak{g} -wertige *Feldstärke*

$$F_{\mu\nu} = \frac{i}{e} [D_\mu, D_\nu] = \partial_\mu A_\nu - \partial_\nu A_\mu - ie[A_\mu, A_\nu] \quad (11.16)$$

ist nicht mehr eichinvariant,

$$F_{\mu\nu}(x) \longrightarrow \Omega(x) F_{\mu\nu}(x) \Omega^{-1}(x). \quad (11.17)$$

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 (11.6) automatisch erfüllt, wenn wir als kovariante Ableitung

$$D_\mu \phi = \partial_\mu \phi - ie R_*(A_\mu) \phi \quad (11.18)$$

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

$$[D_\mu, D_\nu] = \frac{e}{i} R_*(F_{\mu\nu}).$$

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 [72]?

Wie man leicht einsieht, ändert sich der Term

$$\text{tr } F^{\mu\nu} F_{\mu\nu} \quad (11.19)$$

nicht bei einer Eichtransformation (11.15,11.17), 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 Lagrange-dichte für das wechselwirkende System A, ϕ

$$\mathcal{L} = -\frac{1}{4} \text{tr} F^{\mu\nu} F_{\mu\nu} + (D_\mu \phi, D^\mu \phi) - m^2(\phi, \phi). \tag{11.20}$$

Nach Konstruktion ist sie invariant unter den lokalen Eichtransformationen

$$\begin{aligned} \phi(x) &\longrightarrow \phi'(x) = \Omega(x)\phi(x) \\ A_\mu(x) &\longrightarrow A'_\mu(x) = \Omega(x)A_\mu(x)\Omega^{-1}(x) - \frac{i}{e} \partial_\mu \Omega(x) \Omega^{-1}(x). \end{aligned} \tag{11.21}$$

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.

11.1.1 Paralleltransport

Ein Skalarfeld ist kovariant konstant, wenn

$$D_\mu \phi = 0 \quad \text{bzw.} \quad \partial_\mu \phi = ieR_*(A_\mu)\phi \tag{11.22}$$

gilt. Die Integrabilitätsbedingung für die Existenz einer (lokal) eindeutigen Lösung führt in diesem Fall auf

$$\begin{aligned} 0 &= [\partial_\mu, \partial_\nu] \phi \stackrel{(11.22)}{=} ieR_*(\partial_\mu A_\nu - \partial_\nu A_\mu)\phi + ie(R_*(A_\nu)\partial_\mu \phi - R_*(A_\mu)\partial_\nu \phi) \\ &= ieR_*(F_{\mu\nu})\phi, \end{aligned}$$

wobei wir die Linearität und die Darstellungseigenschaft $R_*([X, Y]) = [R_*(X), R_*(Y)]$ der induzierten Darstellung benutzen. Nur für verschwindende Feldstärke können wir (lokal) die d Gleichungen (11.22) 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,

$$\dot{x}^\mu D_\mu \phi = \frac{d\phi(s)}{ds} - ie A_\mu(x(s)) \dot{x}^\mu(s) \phi(s) = 0. \quad (11.23)$$

Wir haben $\phi(x(s)) = \phi(s)$ geschrieben und $R(\Omega) = \Omega$ angenommen. Wäre s eine Zeitvariable, so hätte diese Gleichung die Form der zeitabhängigen SCHRÖDINGER-Gleichung mit \mathbf{g} -wertigem HAMILTONoperator $\sim A(x(s)) \cdot \dot{x}(s)$. Also lautet die Lösung der gewöhnlichen Differentialgleichung (11.23) wie folgt,

$$\begin{aligned} \phi(1) &= \mathcal{P} \left(\exp ie \int_0^1 ds A_\mu(x(s)) \dot{x}^\mu(s) \right) \phi(0), \quad \text{bzw.} \\ \phi(y) &= U(\mathcal{C}; A) \phi(x), \quad U(\mathcal{C}; A) = \mathcal{P} \left(\exp ie \int_{\mathcal{C}} A \right). \end{aligned} \quad (11.24)$$

Nur für ABELSche Theorien kommutieren die Eichpotentiale zu verschiedenen Raumzeitpunkten. In diesem Spezialfall ist keine Ordnung („Zeitordnung“) \mathcal{P} längs des Weges \mathcal{C} nötig.

Ist \mathcal{C}_1 ein Weg von x nach y und \mathcal{C}_2 von y nach z , dann verbindet der zusammengesetzte Weg $\mathcal{C}_2 \circ \mathcal{C}_1$ (zuerst \mathcal{C}_1 und danach \mathcal{C}_2) den Punkt x mit z und es gilt die Kompositionsregel

$$U(\mathcal{C}_2 \circ \mathcal{C}_1; A) = U(\mathcal{C}_2; A) U(\mathcal{C}_1; A). \quad (11.25)$$

Der Paralleltransporter U hängt vom Weg ab, entlang dem ϕ parallel transportiert wird. Sind \mathcal{C}_1 und \mathcal{C}_2 zwei Wege von x nach y , dann ist $\mathcal{C} = \mathcal{C}_2^{-1} \circ \mathcal{C}_1$ eine Schleife von x nach x . Für eine ABELSche Theorie ist nach dem Satz von STOKES

$$U(\mathcal{C}; A) = \exp \left(ie \oint_{\mathcal{C}=\partial\mathcal{G}} A \right) = \exp \left(ie \int_{\mathcal{G}} F \right). \quad (11.26)$$

Darin ist \mathcal{G} das von \mathcal{C} eingeschlossene Gebiet und F die 2-Form der Feldstärke,

$$F = \frac{1}{2} F_{\mu\nu} dx^\mu dx^\nu = dA, \quad \text{mit} \quad A = A_\mu dx^\mu. \quad (11.27)$$

Leider gibt es keine ähnlich einfache Formel für nicht-ABELSche Eichtheorien. Es existiert zwar ein nicht-ABELSches STOKES-Theorem [73], aber es scheint keine interessante Anwendung dieses relativ komplizierten Theorems in der Physik zu geben. Es impliziert aber, dass für $F = 0$ der Paralleltransport wegunabhängig ist, solange die Wege ineinander

deformiert werden können.

Der Paralleltransport mit dem eichtransformierten Feld A' in (11.15) steht in einfacher Beziehung zu demjenigen mit A . Ist \mathcal{C} ein Weg von x nach y , dann gilt nämlich

$$U(\mathcal{C}; A') = \Omega(y)U(\mathcal{C}; A)\Omega^{-1}(x). \quad (11.28)$$

Diese Eigenschaft folgt aus der Definition des weggeordneten Integrals,

$$\mathcal{P} \left(\exp ie \int_{\mathcal{C}} A \right) = \lim_{N \rightarrow \infty} \prod_{i; x_i \in \mathcal{C}}^N \left(\mathbb{1} + ie A_{\mu}(x_i) \dot{x}^{\mu} \Big|_{x_i} \Delta s \right), \quad (11.29)$$

worin x_i ($i = 1, \dots, N$) eine Unterteilung des Weges \mathcal{C} in $N-1$ Abschnitte ist. Für jede Schleife ist deshalb die Variable

$$\text{tr} U(\mathcal{C}, A) \quad (11.30)$$

eichinvariant. Weiterhin ist das Produkt

$$\phi^{\dagger}(y)U(\mathcal{C}_{yx}; A)\phi(x), \quad (11.31)$$

mit einem von x nach y führenden Weg \mathcal{C}_{yx} , eichinvariant. Dieses Produkt hängt für $F \neq 0$ von der Wahl des verbindenden Weges \mathcal{C} ab, nicht aber von der Wahl der Eichung.

Im folgenden werden wir ausnahmslos die EUKLIDSche Version von Eichtheorien untersuchen. Den formalen Übergang von der LORENTZ- zur EUKLIDSchen Signatur haben wir bereits besprochen. Im vorliegenden Fall führt die WICKrotation auf folgende LAGRANGEDichte für eine EUKLIDSche Eichtheorie mit einem geladenen Skalarfeld,

$$\mathcal{L}_E = \frac{1}{4} \text{tr} F^{\mu\nu} F_{\mu\nu} + (D_{\mu}\phi, D^{\mu}\phi) + m^2(\phi, \phi), \quad (11.32)$$

wobei der Zusammenhang zwischen Eichpotential und Feldstärke und die Definition der kovarianten Ableitung sich nicht ändern. Natürlich werden in einer EUKLIDSchen Feldtheorie die Indizes mit der EUKLIDSchen Metrik $\delta_{\mu\nu}$ hoch- und runtergezogen. Zum Beispiel gelten $F_{\mu\nu} = F^{\mu\nu}$ und $F^{\mu\nu} F_{\mu\nu} = \sum F_{\mu\nu}^2$.

11.2 Eichtheorien auf dem Gitter

Es sei nun $\phi(n)$ ein Skalarfeld auf dem Gitter. Verlangt man *lokale Invarianz* unter Symmetrietransformationen

$$\phi(n) \longrightarrow \phi'(n) = \Omega(n)\phi(n), \quad \Omega(n) \in \mathcal{G} \quad (11.33)$$

auf dem Gitter Λ , so sind es die Terme der Art

$$(\phi(n + e_\mu), \phi(n)), \tag{11.34}$$

die diese Invarianz nicht respektieren. Die Tatsache, dass man in diesem Wechselwirkungsterm zwischen nächsten Nachbarn das Skalarprodukt des Feldes an der Stelle $n \in \Lambda$ mit dem Feld an der benachbarten Stelle $n + e_\mu$ bildet, legt nahe, das Feld „parallel zu verschieben“, bevor das Skalarprodukt gebildet wird. Wir ersetzen also den Ausdruck (11.34) durch

$$(\phi(n + e_\mu), U(n + e_\mu, n)\phi(n)), \tag{11.35}$$

mit *Paralleltransporter* $U(n + e_\mu, n)$ von n nach $n + e_\mu$. Dieser Ausdruck ist invariant unter lokalen Transformationen (11.33) des Materiefeldes wenn die Transporter unter lokalen Eichtransformationen durch Konjugation am Anfangs- und Endpunkt transformieren,

$$U(n + e_\mu, n) \longrightarrow U'(n + e_\mu, n) = \Omega(n + e_\mu)U(n + e_\mu, n)\Omega^{-1}(n). \tag{11.36}$$

Im Allgemeinen hängt der Paralleltransport nicht nur von Anfangs- und Endpunkt, sondern auch vom gewählten Weg ab. Auf dem Gitter kann man sich unter $U(n + e_\mu, n)$ den Paralleltransport entlang der Gitterkante vorstellen, obwohl diese Interpretation bedeutungslos ist.

Diese Überlegungen legen nahe, als dynamische Variablen nicht etwa LIE-Algebrawertige Eichpotentiale $A_\mu(x)$, sondern die elementaren gruppenwertigen Paralleltransporter zwischen benachbarten Gitterpunkten zu wählen. Die U -Variablen nennt man *kompakte Variablen*, da alle relevanten (und wahrscheinlich konsistenten) Eichgruppen kompakt sind.

11.2.1 Eine Wirkung für reine Eichtheorien

Die gerichtete Gitterkante von n nach $n \pm e_\mu$ wird kurz mit $(n, \pm\mu)$ 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} :

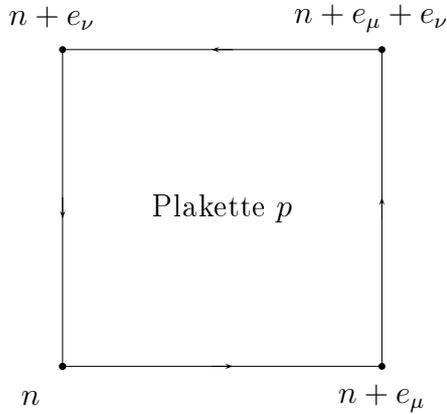
$$U : E = \{(n, \mu)\} \longrightarrow \mathcal{G} \tag{11.37}$$

Der Paralleltransporter längs eines Weges \mathcal{C} auf dem Gitter ist das geordnete Produkt der Transporter der Kanten des Weges und $U(\mathcal{C}^{-1}) = U^{-1}(\mathcal{C})$.

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. Es bezeichne μ und ν die durch e_μ und e_ν aufgespannte Ebene, in welcher die Verschiebung stattfindet. 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. Wir definieren

$$\begin{aligned} U(n, \mu\nu) &\equiv U(n + e_\nu, -\nu)U(n + e_\mu + e_\nu, -\mu)U(n + e_\mu, \nu)U(n, \mu) \\ &= U(n, \nu)^{-1}U(n + e_\nu, \mu)^{-1}U(n + e_\mu, \nu)U(n, \mu). \end{aligned} \tag{11.38}$$



wobei wir (11.37) benutzen. Das Gruppenelement $U_p \equiv U(n, \mu\nu)$ bezeichnet also den Paralleltransporter um eine elementare Plakette p , definiert durch die vier Eckpunkte $n, n + e_\mu, n + e_\mu + e_\nu, n + e_\nu$. Man schreibt oft etwas kürzer

$$U_p = \prod_{\ell \in \partial p} U_\ell. \tag{11.39}$$

Die Abhängigkeit von n ist bei dieser Notation aber nicht offensichtlich. Unter einer Eichtransformation (11.36) transformiert die Plakettenvariable wie folgt,

$$U(n, \mu\nu) \longrightarrow \Omega(n)U(n, \mu\nu)\Omega^{-1}(n). \tag{11.40}$$

Um die Wahl für die eichinvariante und reelle Wirkung zu motivieren, führen wir formal einen Gitterabstand a ein und schreiben

$$U(n, \mu) = e^{ieaA_\mu(n)} \tag{11.41}$$

mit dem LIE-Algebra-Feld $A_\mu(n) = A_\mu^a(n)T_a$. Bilden wir das Produkt der Gruppenelemente um eine elementare Plakette, so erhalten wir

$$\begin{aligned} U_p = U(n, \mu\nu) &= e^{-ieaA_\nu(n)} e^{-ieaA_\mu(n+ae_\nu)} e^{ieaA_\nu(n+ae_\mu)} e^{ieaA_\mu(n)} \\ &= e^{-ieaA_\nu(n)} e^{-ieaA_\mu(n) - ie a^2 \partial_\nu A_\mu(n) + O(a^3)} \\ &\quad e^{ieaA_\nu(n) + ie a^2 \partial_\mu A_\nu(n) + O(a^3)} e^{ieaA_\mu(n)} \end{aligned} \tag{11.42}$$

$$\begin{aligned} &= e^{iea^2 (\partial_\mu A_\nu(n) - \partial_\nu A_\mu(n) - ie[A_\mu(n), A_\nu(n)]) + O(a^3)} \\ &= e^{iea^2 F_{\mu\nu}(n) + O(a^3)}, \end{aligned} \tag{11.43}$$

wobei wir im Schritt von (11.42) zu (11.43) von der BAKER-HAUSDORFF-Formel

$$e^A e^B = e^{A+B+\frac{1}{2}[A,B]+\dots} \tag{11.44}$$

Gebrauch machten und im Exponenten Terme bis zur Ordnung a^2 berücksichtigten. Es folgt

$$U(n, \mu\nu) + U^\dagger(n, \mu\nu) \approx 2 - e^2 a^4 F_{\mu\nu}^2(n) + O(a^5). \tag{11.45}$$

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 Kontinuumslimes* legt folgende Definition für die Wirkung einer EUKLIDischen Eichtheorie nahe:

$$S_{\text{eich}} = \frac{1}{e^2 N} \sum_p \text{tr} \left(\mathbb{1} - \frac{1}{2} (U_p + U_p^\dagger) \right). \tag{11.46}$$

Die Summe erstreckt sich über alle Plaketten im Gitter, d.h. wir erhalten eine Summe über alle Gitterpunkte n (im Kontinuumslimes 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 unitären Darstellung der Eichgruppe gehören. Sind alle $U_p = \mathbb{1}$, dann verschwindet wegen $\text{tr} \mathbb{1} = N$ die Eichwirkung. Für allen anderen Konfigurationen ist S_{eich} positiv. Für $SU(2)$ ist $\text{tr} U$ reell und in der fundamentalen Darstellung wird

$$S_{\text{eich}} = \frac{1}{2e^2} \sum_p \text{tr} (\mathbb{1} - U_p), \quad SU(2) \text{ fundamentale Darstellung.} \tag{11.47}$$

11.2.2 Invariantes Maß und irreduzible Darstellungen

Zur Berechnung der Zustandssumme oder von Erwartungswerten benötigen wir eine Integration über alle 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 $U(n, \mu) \in \mathcal{G}$ entlang der elementaren Kanten ersetzt. Deshalb ist es naheliegend, die formale Inte-

gration über alle Eichpotentiale durch die *invariante Integration* über die Eichgruppe \mathcal{G} zu ersetzen,

$$\int \mathcal{D}A_\mu(x) \longrightarrow \int \prod_{(n,\mu)} dU(n,\mu). \tag{11.48}$$

Dabei dU das bis auf eine multiplikative Konstante eindeutige links- und rechtsinvariante HAAR-Maß auf der kompakten Gruppe,

$$dU = d(\Omega U) = d(U\Omega), \quad \Omega \in \mathcal{G}. \tag{11.49}$$

Wir normieren das invariante Maß, so dass $\int dU = 1$ gilt. Jede kompakte Gruppe besitzt ein derartiges HAAR-Maß. Die Bedingungen (11.49) sind gleichbedeutend mit der Links- und Rechtsinvarianz der *Mittelbildung*,

$$\mathcal{M}(f) \equiv \int_{\mathcal{G}} dU f(U) = \int_{\mathcal{G}} dU f(\Omega U) = \int_{\mathcal{G}} dU f(U\Omega) \tag{11.50}$$

für alle Gruppenelemente Ω und Funktionen $f : \mathcal{G} \rightarrow \mathbb{C}$. Für eine *endliche Gruppe* ist die Mittelbildung gleich dem Mittelwert von f ,

$$\mathcal{M}(f) = \frac{1}{|\mathcal{G}|} \sum_{U \in \mathcal{G}} f(U). \tag{11.51}$$

Die Mittelbildung \mathcal{M} trägt ihren Namen zurecht: sie ist linear, positiv, normiert und invariant. Die Invarianzeigenschaft (11.50) ist evident.

Die Elemente der einfachsten kompakten LIEgruppe $U(1)$ der komplexen, unimodularen Zahlen haben die Form $U = e^{i\alpha}$ mit $\alpha \in [-\pi, \pi)$. Eine Funktion $f : U(1) \rightarrow \mathbb{C}$ ist eine 2π -periodische Funktion des Parameters α . Die Mittelbildung ist dann gegeben durch folgendes Integral über den Parameterraum:

$$\mathcal{M}(f) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\pi}^{\pi} d\alpha f(e^{i\alpha}). \tag{11.52}$$

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

$$Z_\Lambda = \int_{-\pi}^{\pi} \cdots \int_{-\pi}^{\pi} \prod_{\ell \in E} \frac{d\alpha_\ell}{2\pi} \exp \left(\frac{1}{e^2} \sum_p (1 - \cos \sum_{\ell \in \partial p} \alpha_\ell) \right). \quad (11.53)$$

Das Argument der Kosinus-Funktion enthält die Summe über die 4 orientierten Kanten die zum Rand der Plakette p gehören.

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 Gruppenelemente können wie folgt ein-eindeutig parametrisiert werden,

$$\alpha \longrightarrow U(\alpha) = \begin{pmatrix} \alpha_1 + i\alpha_2 & \alpha_3 + i\alpha_4 \\ -\alpha_3 + i\alpha_4 & \alpha_1 - i\alpha_2 \end{pmatrix} \quad \text{mit} \quad \alpha = \begin{pmatrix} \alpha_1 \\ \alpha_2 \\ \alpha_3 \\ \alpha_4 \end{pmatrix} \in S^3. \quad (11.54)$$

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

$$U(\beta)U(\alpha) = U(O(\beta)\alpha) \quad \text{mit} \quad O(\beta)\alpha = \begin{pmatrix} \beta_1 & -\beta_2 & -\beta_3 & -\beta_4 \\ \beta_2 & \beta_1 & -\beta_4 & \beta_3 \\ \beta_3 & \beta_4 & \beta_1 & -\beta_2 \\ \beta_4 & -\beta_3 & \beta_2 & \beta_1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \alpha_1 \\ \alpha_2 \\ \alpha_3 \\ \alpha_4 \end{pmatrix}. \quad (11.55)$$

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 $SU(2)$,

$$dU = \delta(\alpha^2 - 1) d\alpha_1 d\alpha_2 d\alpha_3 d\alpha_4. \quad (11.56)$$

Alternativ können wir für die Punkte auf $\sim S^3$ „Kugelkoordinaten“ einführen,

$$\begin{pmatrix} \alpha_1 \\ \alpha_2 \\ \alpha_3 \\ \alpha_4 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos \theta \\ \sin \theta \cos \psi \\ \sin \theta \sin \psi \cos \varphi \\ \sin \theta \sin \psi \sin \varphi \end{pmatrix}. \quad (11.57)$$

Dies führt auf folgende Parametrisierung der Gruppenelemente,

$$U(\theta, \psi, \varphi) = \begin{pmatrix} \cos \theta + i \sin \theta \cos \psi & \sin \theta \sin \psi e^{i\varphi} \\ -\sin \theta \sin \psi e^{-i\varphi} & \cos \theta - i \sin \theta \cos \psi \end{pmatrix}, \quad (11.58)$$

wobei die auftretenden Winkel eingeschränkte Wertebereiche haben,

$$0 < \theta < \pi, \quad 0 < \psi < \pi \quad \text{und} \quad 0 < \varphi < 2\pi. \quad (11.59)$$

In diesen Koordinaten lautet das HAAR-Maß von $SU(2)$

$$dU = \frac{1}{2\pi^2} \sin^2 \theta \cdot \sin \psi \, d\theta d\psi d\varphi. \quad (11.60)$$

Es definiert ein *invariantes Skalarprodukt* auf den Funktionen $\mathcal{G} \rightarrow \mathbb{C}$,

$$(f, g) \equiv \int_{\mathcal{G}} \bar{f}(U)g(U)dU. \quad (11.61)$$

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 strukturhaltende Abbildung der Gruppe in die Menge der linearen Abbildungen eines Vektorraums V ,

$$R : \mathcal{G} \longrightarrow L(V), \quad R(U_1U_2) = R(U_1)R(U_2), \quad R(\mathbb{1}) = \mathbb{1}. \quad (11.62)$$

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. Dann ist jede Darstellung äquivalent zu einer unitären Darstellung. Endliche und kompakte Gruppen besitzen eine Mittelbildung.

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*

$$(R^{ab}, R'^{cd}) \equiv \int \bar{R}^{ab}(U)R'^{cd}(U) dU = \frac{\delta_{RR'}}{d_R} \delta_{ac}\delta_{bd}, \quad (11.63)$$

wobei $d_R = \text{tr} R(\mathbb{1})$ die Dimension der Darstellung R ist.

Dieses Theorem hat als wichtige Konsequenz das

Lemma: *Die Charakteren $\chi_R(U) = \text{tr} R(U)$ bilden ein vollständiges Orthonormalsystem für den Raum der invarianten Funktionen, $f(\Omega U \Omega^{-1}) = f(U) \subset L_2(dU)$. Insbesondere*

$$(\chi_R, \chi_{R'}) = \delta_{RR'}. \quad (11.64)$$

Dieses Lemma ist nützlich bei der Zerlegung einer reduziblen Darstellung in irreduzible Anteile. Weitere hilfreiche Identitäten liefert das

Lemma: *Es gelten die folgenden Formeln*

$$\begin{aligned} (R^{ab}, \chi_{R'}) &= (\chi_{R'}, R^{ab}) = \frac{\delta_{RR'}}{d_R} \delta_{ab} \\ \int \chi_R(\Omega U^{-1}) \chi_{R'}(U) dU &= \frac{\delta_{RR'}}{d_R} \chi_R(\Omega) \\ \sum_R d_R \chi_R(U) &= \delta(\mathbb{1}, U). \end{aligned} \quad (11.65)$$

Diese werden zum Beispiel bei der Entwicklung für starke Kopplungen benötigt. Für einen Beweis dieser (und weiterer) Formeln verweise ich auf die reichhaltige Literatur über Gruppen und Darstellungen.

11.2.3 Zustandssummen von zweidimensionalen Modellen

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.

\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 Hochtemperaturentwicklung für das ISING-Modell (siehe 4.39),

$$Z = \frac{1}{2^{|E|}} \sum_{\{U\}} e^{-\sum_p \beta(1-U_p)} = \frac{1}{2^{|E|}} \left(\frac{\cosh \beta}{e^\beta} \right)^V \sum_{\{U\}} \prod_p (1 + v U_p), \quad (11.66)$$

wobei $\tanh \beta = v$ gesetzt wurde. Für die \mathbb{Z}_2 -Eichtheorie ist dies eine Entwicklung in $\tan \beta$ mit $\beta \sim 1/e^2$, also eine Entwicklung für starke Kopplung. Wegen

$$\sum_{U_\ell} U_\ell^p = \begin{cases} 2 & p \text{ gerade} \\ 0 & p \text{ ungerade,} \end{cases} \quad (11.67)$$

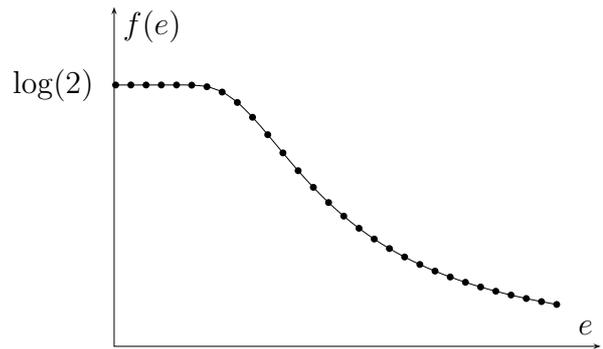
tragen nach Ausmultiplikation des Produktes auf der rechten Seite in (11.66) nur die Terme 1 und $v^V \prod_p U_p$ bei. Es folgt

$$Z = \left(\frac{\cosh \beta}{e^\beta} \right)^V (1 + (\tanh \beta)^V) \xrightarrow{V \rightarrow \infty} \left(\frac{1 + e^{-\beta}}{2} \right)^V. \tag{11.68}$$

Im thermodynamischen Grenzfall $V \rightarrow \infty$ strebt die freie Energiedichte $f = -\log(Z)/V$ gegen

$$\log 2 - \log(1 + e^{-2\beta}).$$

Für schwache Kopplung oder grosse β ist sie gleich $\log(2)$. Im starken Kopplungslimes strebt sie gegen 0.

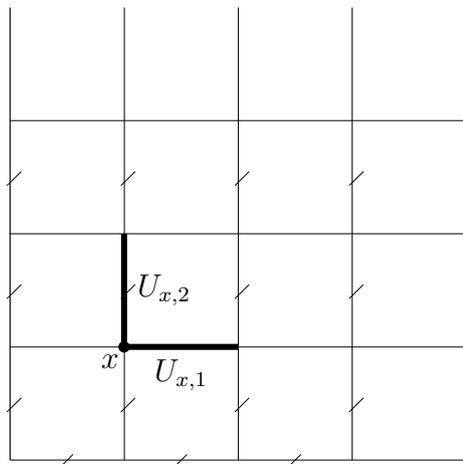


U(1)-Eichtheorie

Die Rechnung vereinfacht sich, wenn wir die Link-Variablen $U_\ell = e^{i\alpha_\ell}$ in der Zustandssumme

$$Z = e^{-\beta V} \int \prod_\ell dU_\ell \prod_p e^{\frac{1}{2}\beta U_p + \frac{1}{2}\beta \bar{U}_p}, \quad U_p = \prod_{\ell \in \partial p} U_\ell \tag{11.69}$$

geschickt transformieren.



Als eichinvariante Variablen könnten wir alle Plakettenvariablen U_p und die POLYAKOV-Schleifen wählen.

$$P(x_2) = \prod_{n=1}^{N_1} U_{(x_1+n, x_2), 1}$$

$$P(x_1) = \prod_{n=1}^{N_2} U_{(x_1, x_2+n), 2}. \tag{11.70}$$

Aber diese Variablen sind nicht unabhängig. Da wir periodische Randbedingungen fordern, ist $\prod_p U_p = 1$.

Nur $V - 1$ Plakettenvariablen sind unabhängig und wir wählen diese als ein Teil der

neuen Variablen. Nun kann man sich leicht überzeugen, dass $P(x_1 + m)P^{-1}(x_1)$ gleich dem Produkt derjenigen Plakettenvariablen ist, die durch die beiden zu $P(x_1 + m)$ und $P(x_1)$ gehörigen Schleifen eingeschlossen werden. Als weitere unabhängige eichinvariante Variablen wählen wir 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 auf den durch einen Schrägstrich gekennzeichneten Links E' ergibt sich der vollständige Satz von V Variablen,

$$\{U_p | p = 1, \dots, V - 1\}, \quad P_1, P_2, \quad \{U_\ell | \ell \in E'\} \quad (11.71)$$

Wegen der Links- und Rechtsinvarianz des HAAR-Maßes folgt

$$Z = e^{-\beta V} \int \prod_{p=1}^{V-1} dU_p \prod_{p=1}^V e^{\frac{1}{2}\beta(U_p + \bar{U}_p)} \int dP_1 dP_2 \int \prod_{\ell \in E'} dU_\ell. \quad (11.72)$$

Darin ist die Plakettenvariable U_V wegen $\prod U_p = 1$ von den anderen Plakettenvariablen abhängig. Also erhalten wir

$$Z = e^{-\beta V} \prod_{p=1}^V \int dU_p e^{\frac{1}{2}\beta(U_p + \bar{U}_p)} \delta(1, U_1 U_2 \cdots U_V). \quad (11.73)$$

Für die Gruppe $U(1)$ sind alle irreduziblen Darstellungen eindimensional und mit $U = e^{i\alpha}$ ist die Formel $\delta(1, U) = \sum U^n$ in (11.65) äquivalent zur FOURIERdarstellung der δ -Distribution. Dies führt auf folgende explizite Formel für die Zustandssumme einer 2-dimensionalen $U(1)$ Gittereichtheorie mit periodischen Randbedingungen,

$$\begin{aligned} Z &= e^{-\beta V} \sum_{n \in \mathbb{Z}} \prod_{p=1}^V \int (dU_p e^{\beta \cos \alpha} U_p^n) \\ &= e^{-\beta V} \sum_{n \in \mathbb{Z}} \left(\int_{-\pi}^{\pi} \frac{d\alpha}{2\pi} e^{\beta \cos \alpha + i n \alpha} \right)^V = e^{-\beta V} \sum_{n \in \mathbb{Z}} I_n(\beta)^V. \end{aligned} \quad (11.74)$$

Die zugehörige freie Energiedichte hat die Form

$$f(\beta, V) = \beta - \frac{1}{V} \log \left(\sum I_n(\beta)^V \right). \quad (11.75)$$

\mathbb{Z}_N -Eichtheorien

Dieselbe Variablenänderung führt für die Zustandssumme einer \mathbb{Z}_N -Theorie

$$Z = \sum_{\{U\}} e^{-\beta(1-\frac{1}{2}U_p-\frac{1}{2}\bar{U}_p)}, \quad U_\ell, U_p \in \{z = e^{2\pi i/N}, z^2, \dots, z^N = 1\}, \quad (11.76)$$

mit Hilfe der Darstellung

$$\frac{1}{N} \sum_{n=1}^N e^{2\pi i n k/N} = \delta_{(k \bmod N), 0} \quad (11.77)$$

für das N -periodische KRONECKERSymbol, auf folgende Reihendarstellung für die Zustandssumme

$$Z = e^{-\beta V} \sum_{n=1}^N F_N(n, \beta)^V, \quad F_N(n, \beta) = \frac{1}{N} \sum_{m=1}^N e^{\beta \cos(2\pi m/N) + 2\pi i m n/N}. \quad (11.78)$$

Für $N = 2$ stimmt dies mit dem Resultat (11.68) für die \mathbb{Z}_2 -Gittereichtheorie überein und für $N \rightarrow \infty$ mit der Formel (11.74) für die $U(1)$ -Theorie.

Nicht-Abelsche Eichtheorien

Wie für die $U(1)$ -Theorie wählen wir als unabhängige Variablen die Plaketten-, POLYAKOVschleifen- und speziellen Linkvariablen in (11.71). Als Wirkung wählen wir (11.46), wobei die Linkvariablen und Plakettenvariablen in einer irreduziblen Darstellung R der Eichgruppe liegen. Es sei $\chi_R(U) = \text{tr } R(U)$ der Charakter dieser Darstellung. Dann nimmt die Wirkung folgende Form an,

$$S_{\text{eich}} = \beta \sum_p \left(1 - \frac{1}{2N} \chi_R(U_p) - \frac{1}{2N} \bar{\chi}_R(U_p) \right) \quad \text{mit} \quad \beta = \frac{1}{e^2}. \quad (11.79)$$

Wie oben müssen wir die Nebenbedingung

$$\prod U_p = \mathbb{1}$$

berücksichtigen. Dabei ist es nützlich, die vollständige und orthonormierte Basis der Charakteren χ_R für die Klassenfunktionen auf der Gruppe einzuführen,

$$\chi_R(U) = \text{tr } R(U), \quad \chi_R(\Omega U \Omega^{-1}) = \chi_R(U).$$

Hier ist $U \rightarrow R(U)$ eine irreduzible Darstellung der kompakten Gruppe \mathcal{G} . Jede Klassenfunktion hat nach dem Lemma auf Seite 243 die Entwicklung

$$f = \sum_R (\chi_R, f) \chi_R, \tag{11.80}$$

wobei das Skalarprodukt mit dem HAARSchen Maß definiert ist,

$$(f, g) = \int dU \bar{f}(U) g(U). \tag{11.81}$$

11.2.4 Observablen der reinen Eichtheorien

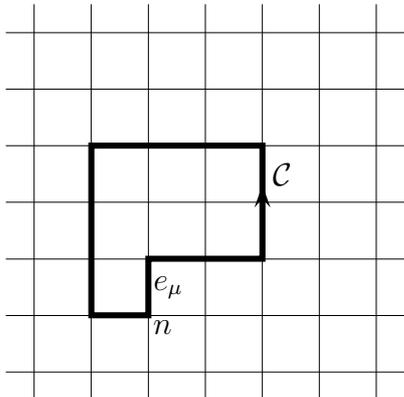
Da die Gitterwirkungen und das HAAR-Maß eichinvariant sind, ist das normierte Maß im Funktionalintegral

$$d\mu[U] = \frac{1}{Z} e^{-S_{\text{eich}}[U]} \prod_{\ell \in E} dU_\ell, \quad Z = \int e^{-S_{\text{eich}}[U]} \prod_{\ell \in E} dU_\ell, \tag{11.82}$$

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 die Erwartungswerte von Funktionen der dynamischen Variablen

$$\begin{aligned} \langle F[U] \rangle &= \int d\mu[U] F[U] = \int d\mu[U] F[U^\Omega] = \langle F[U^\Omega] \rangle, \\ U &= \{U(n, \mu)\}, \quad U^\Omega = \{\Omega(n + e_\mu) U(n, \mu) \Omega^{-1}(n)\}, \end{aligned} \tag{11.83}$$

für beliebige lokale Eichtransformationen $\{\Omega(n)\}$. Es ist also nur sinnvoll, Erwartungswerte von eichinvarianten Größen zu betrachten.



Eichinvariante Funktionen der Variablen $\{U(n, \mu)\}$ sind die Spuren von Produkten von U 's entlang geschlossener Wege (Schleifen). Wir definieren

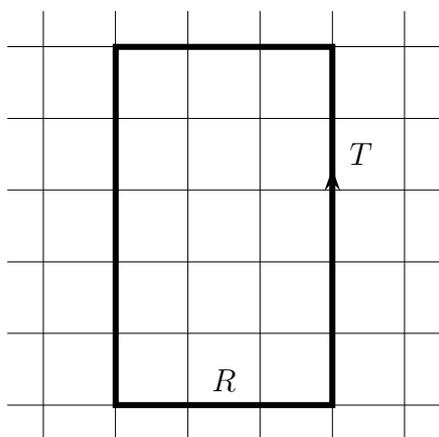
$$W[\mathcal{C}] = \text{tr} \prod_{i=1}^L U(n_i, \mu_i)|_{\mathcal{C}}. \tag{11.84}$$

Dabei beschreibt (n_i, μ_i) mit $n_{i+1} = n_i + e_{\mu_i}$ und $n_{L+1} = n_1$ eine Folge von gerichteten Kanten zu der Schleife \mathcal{C} .

Die Größen $W[\mathcal{C}]$ sind für geschlossene Wege (Schleifen) \mathcal{C} eichinvariant. Man kann sich überlegen, dass die allgemeinste eichinvariante Größe eine Funktion der Paralleltransporter entlang geschlossener Wege ist. Die Bezeichnung für $W[\mathcal{C}]$ 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 (11.84), manchmal auch den Erwartungswert von W . Wir werden im folgenden die eichinvarianten W in (11.84) 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 derartiger Schleifen wird zur Zeit am Lehrstuhl Quantentheorie untersucht [74].

11.2.5 Die Stringspannung



Es sei nun $W[R, T]$ eine WILSON-Schleife zu einer ebenen und rechteckigen Schleife mit den Kantenlängen R und T . Die Funktion

$$V_{q\bar{q}}(R) = - \lim_{T \rightarrow \infty} \frac{1}{T} \log \langle W[R, T] \rangle \quad (11.85)$$

wird als statisches $q\bar{q}$ -Potential interpretiert. Die Größe

$$\sigma = \lim_{R \rightarrow \infty} \frac{V_{q\bar{q}}(R)}{R} \quad (11.86)$$

heisst *Stringspannung*. Sie ist ein Ordnungsparameter zur Unterscheidung zwischen Confinement bzw. Nicht-Confinement in einer reinen Eichtheorie.

Akzeptiert man für $V_{q\bar{q}}(R)$ die Interpretation als Potential zwischen zwei von aussen eingebrachten statischen Ladungen, so bedeutet $\sigma \neq 0$, dass die potentielle Energie mit dem Abstand der Ladungen zunimmt, und für asymptotisch entfernte Ladungen unendlich groß würde, so



dass dieser Zustand in einer dynamischen Theorie nicht auftritt. Das lineare Anwachsen der Energie mit dem Abstand könnte erklärt werden, wenn sich zwischen den äußeren

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 Strings Spannung nimmt dagegen die potentielle Energie für sehr große Abstände kaum mehr zu. Es sollte also möglich sein, dem System genügend Energie zuzuführen, um eine Trennung der Ladungen zu erreichen.

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 WILSONschleife vor,

$$\begin{aligned} \langle W[\mathcal{C}] \rangle &\sim e^{-TV_{q\bar{q}}(R)} \sim e^{-\text{Fläche}} && \text{Confinement} \\ \langle W[\mathcal{C}] \rangle &\sim e^{-TV_{q\bar{q}}(R)} \sim e^{-\text{Umfang}} && \text{kein Confinement.} \end{aligned} \quad (11.87)$$

SEILER, 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 [75]. Für große Abstände hat das statische Potential die Form

$$V_{q\bar{q}}(R) \sim \sigma R - \frac{c}{R} + \text{const} + o(L^{-1}) \quad (11.88)$$

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 [76].

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

$$\exp(iS) \longrightarrow \exp\left(iS + i \int d^4x j^\mu A_\mu\right). \quad (11.89)$$

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

$$j^\mu(x) = e \int_{\mathcal{C}} d\tau \dot{x}^\mu(\tau) \delta^4(x - z(\tau))$$

lautet dann der zusätzliche Phasenfaktor in (11.89) folgendermassen,

$$\exp\left(i \int d^4x j^\mu A_\mu\right) = \exp\left(ie \int_{\mathcal{C}} dz^\mu A_\mu(z)\right) = \exp\left(ie \int_{\mathcal{C}} A\right), \quad (11.90)$$

wobei längs des durch $z(\tau)$ spezifizierten Weges \mathcal{C} zu integrieren ist. Die EUKLIDSche Form erhält man durch die Substitutionen $j^0 = -ij_4$, $dz^0 = -idz_4$ und $A_0 = iA_4$. Die Phase (11.90) bleibt beim Übergang zur EUKLIDSche Theorie eine Phase. Wählt man für \mathcal{C} eine Schleife, so entspricht die Zustandssumme in Gegenwart eines stationären Stromes,

$$\frac{1}{Z} \int \mathcal{D}A_\mu \exp\left(-S_E[A] + ie \oint_{\mathcal{C}} A\right) = \left\langle \exp\left(ie \oint_{\mathcal{C}} A\right) \right\rangle = \langle W[\mathcal{C}] \rangle, \quad (11.91)$$

genau der Kontinuumsversion des Erwartungswertes der WILSONSchleife.

11.3 Starke Kopplungsentwicklung

Die Wirkung einer reinen Eichtheorie auf dem Gitter

$$S_{\text{eich}} = -\beta \sum_p \text{tr} \left(\mathbb{1} - \frac{1}{2} (U_p + U_p^\dagger) \right), \quad \beta = \frac{2}{Ne^2}, \quad (11.92)$$

hat mit der nackten Kopplung e nur einen freien Parameter. Eine Gittereichtheorie kann als klassisches statistisches System 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,

$$\langle W[\mathcal{C}] \rangle = \frac{1}{Z} \int d\mu[U] W[\mathcal{C}], \quad Z = \int d\mu[U], \quad (11.93)$$

für starke Kopplung durch ein Flächengesetz bestimmt ist.

Wir brauchen folgende wesentlichen Eigenschaften des HAAR-Maßes:

$$\int_{\mathcal{G}} dU = 1 \quad , \quad \int_{\mathcal{G}} dU U_{\alpha\beta} = 0 \quad , \quad \int_{\mathcal{G}} dU U_{\alpha\beta} U_{\gamma\delta}^\dagger = c \delta_{\alpha\delta} \delta_{\beta\gamma}. \quad (11.94)$$

Die erste Bedingung ist die Normierung des HAAR-Maßes. Die zweite Bedingung gilt für jede nicht-triviale Darstellung der Gruppe, da wegen der Invarianz des Maßes

$$\int dU U_{\alpha\beta} = g_{\alpha\gamma} \left(\int dU U_{\gamma\delta} \right) g'_{\delta\beta}. \quad (11.95)$$

für alle Gruppenelemente g und g' gilt. Wenn U nicht-trivial transformiert, dann folgt sofort

die zweite Gleichung in (11.94) Die letzte Gleichung begründet man nun ganz analog.

Ähnlich wie für Spinmodelle entwickeln wir das BOLTZMANN-Gewicht in (11.61) nach Potenzen von $\beta \sim 1/g^2$,

$$\exp\left(-\beta \sum_p \operatorname{tr} \left\{ \mathbb{1} - \frac{1}{2}(U_p + U_p^\dagger) \right\}\right) = \prod_p \left(1 - \beta \operatorname{tr} \left\{ \mathbb{1} - \frac{1}{2}(U_p + U_p^\dagger) \right\} + O(\beta^2)\right).$$

Wegen (11.94) hat die Entwicklung der Zustandssumme für starke Kopplung die Form

$$Z = 1 + O(\beta^2) = 1 + O(1/g^4). \quad (11.96)$$

Für den Zähler im Erwartungswert (11.93) erhalten wir

$$\int \prod_{n,\mu} dU(n,\mu) \operatorname{tr} \{U(\ell_1)U(\ell_2) \cdots U(\ell_L)\} \cdot \prod_p \left(1 - \beta \operatorname{tr} \left\{ \mathbb{1} - \frac{1}{2}(U_p + U_p^\dagger) \right\} + O(\beta^2)\right). \quad (11.97)$$

Dabei bezeichnen $\ell_i = (n_i, \mu_i)$ $i = 1, \dots, L$ die orientierten Gitterkanten der geschlossenen Schleife der Länge L . Wegen der zweiten Eigenschaft in (11.94) verschwindet der erste Term dieser Entwicklung, es sei denn, \mathcal{C} ist eine Schleife die einen Weg vorwärts und zurück durchläuft. Für eine Schleife, die eine nicht-verschwindende Fläche einschliesst, ist der führende Term dadurch gegeben, dass jedes U_ℓ mindestens zweimal auftritt, und zwar zu entgegengesetzten Richtungen der Kante ℓ gehörend. Dann muß von dem BOLTZMANN-Gewicht ein Produkt von Plakett-Variablen beitragen, welches gerade die WILSON-Schleife \mathcal{C} schliesst. In anderen Worten, es tragen in der Entwicklung des Gewichts nur Produkte bei, deren Plaketten eine 2-Kette mit Rand \mathcal{C}^{-1} bilden. Der führende Beitrag zum Zähler, und damit zu Erwartungswert (11.93) ist somit

$$\langle W[\mathcal{C}] \rangle \sim \left(c^2 \frac{2}{Ng^2}\right)^A = \exp\left(-\log \frac{Ng^2}{2c^2} A\right), \quad (11.98)$$

wobei A die Anzahl Plaketten ist, welche die Minimalfläche A mit $\partial A = \mathcal{C}$ aufspannen. Für eine rechteckige WILSONschleife ist $A = RT$. Der Beitrag c^{2A} kommt von den U -Integrationen, da in führender Ordnung die Anzahl Gitterlinien innerhalb A gleich $2A$ ist.

Man kann dieses Argument natürlich noch verbessern. Offensichtlich tragen zum Zähler in (11.93) genau diejenigen Flächen bei, deren Rand gleich \mathcal{C}^{-1} ist. Dabei können auch geschlossene Flächen ohne Rand beitragen. Der Beitrag dieser nicht-zusammenhängenden Flächen werden durch den Nenner aufgehoben. Die Flächen mit Rand \mathcal{C}^{-1} können Selbst-

überschneidungen haben oder von randlosen Flächen berührt werden. In jedem Fall erwartet man eine Darstellung der Form

$$\langle W[C] \rangle = \sum_{c_2; \partial c_2 = -C} e^{-\sigma A(c_2)}, \quad (11.99)$$

mit einer Stringspannung σ . Bisher ist es im Kontinuum leider noch nicht gelungen, eine vergleichbare Formel zu *beweisen*¹.

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.

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] M. Kac, *On Some Connection between Probability Theory and Differential and Integral Equation*, Proc. 2nd Berkeley Smpos. Math. Stat. and Prob. (1951) 189.
- [30] M. Creutz und B.A.Freedman, *A statistical approach to quantum mechanics*, Annals of Physics **132** (1981) 427.
- [31] 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/>
- [32] W. Lenz, *Beitrag zum Verständnis der magnetischen Erscheinungen in Festkörper*, Z. Physik **21** (1920) 613.
- [33] E. Ising, *Beitrag zur Theorie des Ferromagnetismus*, Zeitschrift f. Physik **31** (1925) 253.
- [34] R.B. Potts, *Some generalized order-disorder transformations*, Proc. Camb. Phil. Soc. **48** (1952) 106.
- [35] 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.
- [36] F.Y. Wu, *Self-dual property of the Potts model in one dimension*, cond-mat/9805301.
- [37] 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.
- [38] I.G. Enting, A.J. Guttmann und I. Jensen, *Low-temperature series expansions for the spin-1 Ising model*, J. Phys. **A27** (1994) 6987.

- [39] R. Savit, *Duality in field theory and statistical systems*, Rev. of Mod. Phys. **52** (1980) 453.
- [40] 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.
- [41] H.A. Kramers und G.H. Wannier, *Statistics of the Two-Dimensional Ferromagnet. Part I*, Phys. Rev. **60** (1941) 252.
- [42] L. Onsager, *Crystal Statistics. I. A Two-Dimensional Model with an Order-Disorder Transition*, Phys. Rev. **65** (1944) 117.
- [43] G. Sylvester, *Continuous Spin Inequalities for Ising Ferromagnets*, MIT-preprint 1975.
- [44] 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;
- [45] 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;
- [46] 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.
- [47] 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.

- [48] 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.
- [49] 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.
- [50] E. Elizalde, S.D. Odintsov, A. Romeo, A.A. Bytsenko und S. Zerbini, *Zeta Regularization Techniques with Applications*, River Edge, NJ: World Scientific, 1994.
- [51] I. Sachs und A. Wipf, *Finite Temperature Schwinger Model*, Helv. Phys. Acta **65** (1992) 652; A. Dettki und 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.
- [52] L. O’Raifeartaigh, A. Wipf und H. Yoneyama, *The Constraint Effective Potential*, Nucl. Phys. **B271** (1986) 653.
- [53] Y. Fujimoto, L. O’Raifeartaigh und G. Parravicini, *Effective Potential for nonconvex Potentials*, Nucl. Phys. **B212** (1983) 268.
- [54] J. Goldstone, A. Salam und 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).
- [55] C. Wiesendanger und A. Wipf, *Running Coupling Constants From Finite Size Effects*, Annals Phys. **233** (1994) 125.
- [56] 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.
- [57] Y. Fujimoto, A. Wipf und H. Yoneyama, *Symmetry Restoration of Scalar Models at Finite Temperature*, Phys. Rev. **D 38** (1988) 2625-2634.
- [58] K. Wilson, in *New Phenomena in Subnuclear Physics*, ed. A. Zichichi, Plenum, New York 1977; L. Susskind, Phys. Rev. **D16** (1977) 3031.
- [59] *Hamiltonian formulation of Wilson’s lattice gauge theory*, J. Kogut und L. Susskind, Phys. Rev. **D11** (1975) 395.

- [60] 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.
- [61] L.H. Karsten und J. Smit, *The Vacuum Polarization with SLAC Lattice Fermions*, Phys. Lett. **B85** (1979) 100.
- [62] 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.
- [63] D. Friedan, *A Proof of the Nielson Ninomiya Theorem*, Commun. Math. Phys. **85** (1982) 481.
- [64] C. Itzykson und J.M. Drouffe, *Statistical Field Theory I*, Cambridge monographs on mathematical Physics, CUP, 1989.
- [65] P.H. Ginsparg and K.G. Wilson, *A Remnant of Chiral Symmetry on the Lattice*, Phys. Rev. **D25** (1982) 2649.
- [66] M. Lüscher, *Exact chiral symmetry on the lattice and the Ginsparg-Wilson relation*, Phys. Lett. **B428** (1998) 342.
- [67] 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.
- [68] 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.
- [69] 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.
- [70] 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.
- [71] 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.
- [72] Philippe de Forcrand und Oliver Jahn, *Comparison of $SO(3)$ and $SU(2)$ Lattice Gauge Theory*, Nucl. Phys. **B651** (2003) 125.
- [73] 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.
- [74] L. Dittmann, T. Heinzl und A. Wipf, *An effective Lattice Theory for Polyakov Loops*, JHEP **0406** (2004) 005.
- [75] 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.
- [76] M. Lüscher, K. Symanzik und P. Weisz, *Anomalies of the free loop wave equation in WKB approximation*, Nucl. Phys. **B173** (1980) 365.
- [77] B. Kaufmann und L. Onsager, *Crystal Statistics. III. Short-Range Order in a Binary Ising Lattice*, Phys. Rev. **76** (1949) 1244.
- [78] 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

- Überlapp-Fermionen, 227
- Überlapp-Operatoren, 227
- äußere Quelle, 176
- 2-Zustandssystem, 48
- 3-Zustandssystem, 49
- 3/8-Regel, 31

- Ableitung
 - antisymmetrische, 215
- Akzeptanzrate, 47
- apriori-Mass, 128
- Attraktor, 147

- Baker-Hausdorff Formel, 241
- Blockkern, 160
- Blockspin, 160
- Blockspintransformation
 - Beispiel, 162
- Boltzmannfaktor, 71
- Brownsche Bewegung, 16

- chiral verbesserte Operatoren, 227
- chirale Symmetrie, 211
- chiraler Limes, 211
- Clustereigenschaft, 77
- Co-Rand, 135
- Co-Randoperator, 134
- constraint effective Potential, 183
- constraint effective potential, 184
 - in MFA, 200
- Curie-Temperatur, 69
- Curie-Weiss-Gesetz, 95

- Darstellung, 244
 - irreduzible, 244
- de Rham-Gruppen, 143
- Detailliertes Gleichgewicht, 46
- Determinante
 - eines Operators, 172
- Dezimierungsprozedur, 146
- Dichtematrix, 71
- Differenzenkalkül, 132
- Diffusionsgleichung, 15
- dimensionale Umwandlung, 207
- Divergenz einer 1-Kette, 136
- domain-wall Fermionen, 227
- Dualität
 - für 3d Ising-Modell, 120
- Dualitätsrelation
 - für 1d Pottsmodelle, 85

- effektive Wirkung, 185, 186
 - in MFA, 200
 - variationelle Charakterisierung, 198
- effektives Potential, 175, 176
 - in der QM, 181
 - in MFA, 200
 - konventionelles, 177
 - Loop-Entwicklung, 185
- Eichfixierung, 122
- Eichpotential, 233
- Eichtheorie
 - $U(1)$, 246
 - \mathbb{Z}_2 , 245
- Eichtheorien
 - Euklidische, 238

- im Kontinuum, 232
- Eichtransformation
 - in \mathbb{Z}_2 -Eichtheorie, 122
- Energie
 - freie, 72
 - innere, 72
- Energiedichte
 - freie, 72, 75
 - innere, 75
- Energielücke, 20
- Entropie, 197
- Entwicklung
 - für Eichtheorien bei starker Kopplung, 252
- Erwartungswert, 65
 - in Spinmodellen, 72
- Erwartungswerte
 - thermische, 170
- erzeugende Funktion, 24
- Euklidische Feldoperatoren, 170
- exakte Sequenz, 143
- Extrapolation zum kritischen Punkt, 104
- Feldquantisierung, 1
- Feldstärke, 233, 235
- Fermionen
 - naive auf Gitter, 218
- Feynman-Kac-Formel, 11, 13
- Fixpunkt, 152
 - der RG-Transformation, 148, 154
- Fixpunkt-Operatoren, 227
- Flächengesetz, 251
- Form, 141
 - exakte, 142
 - geschlossene, 142
- Fouriertransformation
 - diskrete, 216
- freie Energie, 20, 72
- Freie Felder, 169
- Fugazität, 81
- Funktionaldeterminante, 172
- Gamma-Matrizen
 - Euklidische, 210
- Gapgleichung, 200
- Gesetz der großen Zahlen, 38, 66
- Gibbs-Phänomen, 218
- Ginibre-Ungleichung, 130
- Ginsparg-Wilson Relation, 226
- Gitter, 73
 - duales, 114, 193
 - kubisches, 70
- Gitterableitung
 - naive, 215
- Gitterableitungen, 213
- Gittereichtheorie
 - Funktionalintegral, 241
 - Wilson-Wirkung, 241
- Gittereichtheorien, 232
 - ohne Materie, 238
 - zweidimensionale, 245
- Gitterregularisierung
 - für Skalarfeld, 191
- Gitterwirkung
 - für Fermionen, 218
- GKS-Ungleichung (1), 129
- GKS-Ungleichung (2), 130
- Gradient einer 0-Kette, 136
- Grassmann-Algebra, 212
- Grassmann-Integral, 213
- Grassmann-Variable, 212
- Grassmann-Variablen, 211
- Greenfunktion
 - der Vorwärtsableitung, 214
 - für antisymmetrische Ableitung, 215
- Grenzwertsatz, 37
- Gruppe
 - endliche, 242

- Haar-Maß, 242, 245
 von $SU(2)$, 243
- Haarmaß
 $SU(2)$, 244
 $U(1)$, 242
- Hamiltonoperator, 9
- Heisenberg-Bild, 9
- Higgsfeld, 169
- Hilbertraum, 9
- Hodgekomplex, 141
- Homologiegruppen, 143
- important sampling, 39
- Impulsoperator
 für Slac-Ableitung, 217
- innere Energie, 72
- innere Energiedichte, 157
- Interpolationspolynome, 28
- invariante Gruppenintegration, 242
- invariantes Maß, 241
- Inzidenzmatrix, 134
- irrelevante Störung, 156
- Ising-Kette, 73
- Ising-Modell, 69
 T_c in 2 Dimensionen, 116
 Energiefunktion, 71
 Hochtemperaturentwicklung für χ , 101
 Hochtemperaturentwicklung für Z , 100
 Tieftemperaturentwicklung für m_0 , 110
 Tieftemperaturentwicklung für f , 109
 Zustandssumme, 71
- Isingkette
 hohe Temperaturen, 79
 Nullstellen von Z , 82
 Simulation von, 87
 tiefe Temperaturen, 78
- Isingmodell
 in 2 Dimensionen, 92
 tiefe Temperaturen, 106
- kanonische Zustandssumme, 19
- kanonisches Ensemble, 71
- Keplersche Fassregel, 31
- Kette, 133
- Kettengruppe, 133
- Klein-Gordon Gleichung, 170
- Komplex
 dualer, 139
- Konfiguration, 71
- Kontinuumsimes, 203, 206
 für freies Skalarfeld, 203
 für Spinmodelle, 206
 naiver, in Gittereichtheorien, 241
- konvexe Hülle, 180
- Korrelationsfunktion, 73
 verbundene, 23
- Korrelationsfunktionen
 in Quantenstatistik, 20
 thermische, 20
- Korrelationslänge, 76, 205
- Korrelationsungleichung, 128
- kovariante Ableitung, 233
- Krümmung, 240
- Kramers-Wannier Dualität, 113
- kritische Exponent, 95
- kritische Exponenten, 157
 für Materialien, 158
- kritische Temperatur
 für ϕ^4 -Theorie, 190
- kritische Exponenten
 für Modelle, 159
- Lagrange Polynome, 28
- Lagrangedichte
 für Abelsche Eichtheorie, 232
 skalare Elektrodynamik, 234
- Laplace-Operator
 auf dem Gitter, 219
- Lee-Yang-Nullstellen, 81

- Legendre-Transformation, 177
- Leibniz-Regel
auf dem Gitter, 194
- Linksableitung, 214
- lokale Symmetrie, 122
- lokaler Operator, 228
- Magnetisierung, 73, 75, 157
der Isingkette, 75
- marginale Störung, 156
- Markovprozess, 41
- Masse
physikalische, 205
- Matrix
stochastische, 41
- Matrizen
stochastische, 41
- Maxwell-Konstruktion, 200
- Mehrheitsregel, 163
- Mellin-Transformation, 173
- Metropolis Algorithmus, 46
- Metropolis-Algorithmus, 38
- Milne-Regel, 31
- minimale Kopplung, 234
- Mittelbildung, 242
- Mittelwert, 65
- Molekularfeldnäherung, 92
- Monte Carlo Iteration, 48
- Monte Carlo Simulationen, 27
- Monte-Carlo Integration, 33
- Monte-Carlo Renormierung, 160
- nackte Masse, 205
- Nielsen-Ninomiya Theorem, 224
- Observablen
in reinen Eichtheorien, 249
- Ordnungsparameter, 96
- Oszillator
anharmonischer, 52
harmonischer, 23
- Overlap-Fermionen, 227
- Paralleltransport, 236
- Paralleltransporter, 237, 239
elementar, 239
- Peierls Argument, 123
- Peierls-Konturen, 126
- Peierls-Ungleichung, 124
- Percus-Ungleichung, 131
- Pfadintegral
Euklidisches, 14
in statistischer Mechanik, 19
zu imaginären Zeiten, 18
- Phasenraum, 8
- Phasentransformation, 233
- Plakettenvariable, 240
- Poisson-Klammer, 8
- Polyakovschleife, 247
- Polynome
Lagrangesche, 28
- Pottsmodelle, 84
- Propagator
für freies Teilchen, 7, 11
für imaginäre Zeiten, 21
- Propagator für Skalarfeld, 192
- Quantenelektrodynamik, 2
- Quantisierung
zweite, 1
- Rückwärtsableitung, 214
- Randbedingungen
antiperiodische, 192
feste, 191
offene, 191
periodische, 191
- Randoperator, 134
- Rechteckregel, 31
- Rechtsableitung, 214

- relevante Störung, 156
 Renormierungsgruppe, 144
 Renormierungsgruppenfluss, 154
 Renormierungsgruppentransformation, 147
 für 2d Isingmodell, 149
 für Ising-Kette, 145
 RG-Transformation
 linearisierte, 155
 Riemannintegral, 28
- Satz
 von Frobenius, 77
 von Lie, 11
 von Perron und Frobenius, 77
 von Peter-Weyl, 244
 von Stokes, 136, 141, 237
 von Trotter, 12
- Schingerfunktionen
 für Skalarfeld, 171
- Schrödingerbild, 10
 Schrödingergleichung, 10
 Schwinger-Funktional, 186
 Schwingerfunktion, 175
 Schwingerfunktional, 23
 Schwingerfunktionen, 17
 Selbstkonsistenzgleichung, 94, 200
 Selektionswahrscheinlichkeit, 47
 Semiklassische Entwicklung
 von Γ , 187
- Simlex, 132
 Simplex, 132, 141
 orientierter, 132
- Simplizialkomplex, 133
 Simpsonregel, 31
 Skalarfeld, 170
 Skalarprodukt
 invariantes, 244
 Skalenfeld, 156
 Skalengesetze, 157
- Skalenoperator, 156
 Skalenrelationen, 159
 im engeren Sinne, 159
 Skalenverhalten
 der freien Energiedichte, 155
 Slac-Ableitung, 216
 Spinmodelle, 69
 Spinorfelder, 210
 auf dem Gitter, 213
 spontane Magnetisierung, 73
 spontane Symmetriebrechung, 185
 Spur
 eines Operators, 173
- Störungstheorie, 2
 stochastische Matrix
 attraktive, 43
 Stringsannung, 250
 Suszeptibilität, 157
 in der MFA, 95
 Symmetriebrechung
 spontane, 185
- Transfermatrix, 69, 74
 1d-Isingmodell, 74
 für 1d-Pottsmodelle, 85
 Trapezregel, 31
 Trotter-Produktformel, 11
- ultralokaler Operator, 228
 Umfanggesetz, 251
 Ungleichung
 von Fenchel und Young, 179
 Universalität, 159
- Vakuum-Vakuum Amplitude, 170
 Vakuumerwartungswert, 16
 Vektor
 stochastischer, 41
 Verdopplungsproblem, 218, 221
 Virialsatz, 53

- Vorwärtsableitung, 214
- Wärmeleitungskern, 173
- Wegordnung, 237
- Wickdrehung, 14
- Wiener-Maß, 14
- Wightmanfunktionen, 16, 171
- Wilso-Schleifen, 122
- Wilson Fermionen, 221
- Wilson-Parameter, 221
- Wilsonschleife, 122
- Yang-Mills Term, 235
- zeitgeordnetes Produkt
 - von Feldoperatoren, 170
- Zelle, 133, 141
- Zellkomplex, 133
- Zeta-Funktion, 172
- Zufallsvariable, 65
- Zufallsvariablen
 - unabhängige, 65
- Zustandssumme, 19, 71
 - eindimensionales Isingmodell, 74
 - für 1d Pottsmodelle, 85
 - für Skalarfeldtheorie, 171
 - von $U(1)$ -Gittereichtheorie, 243
- Zweipunktfunktion
 - des dualen Ising-Modells, 118
 - verbundene, 21
- Zyklus, 142