Pfadintegrale in Quantenmechanik und Feldtheorie
-
Die kanonische Zustandssumme

Christopher Pinke

30. Januar 2008

Inhaltsverzeichnis

1 Einleitung

Die Zustandssumme eines Ensembles ist in der statistischen Physik die zentrale Größe zur Beschreibung von Systemen mit vielen Freiheitsgraden, da aus ihr alle thermodynamischen Größen folgen.
Eine ähnlich zentrale Rolle im Pfadintegralformalismus spielt das erzeugende Funktional. Aus ihm folgen alle Korrelationsfunktionen bzw. Vakuumerwartungswerte.
Die Analogie der beiden Größen stellt nun eine mögliche Verbindung zwischen Statistik und Feldtheorie dar. Wie im Folgenden gezeigt wird, lassen sich so statistische Systeme mit feldtheoretischen Methoden auswerten.
Als Beispiel soll hier das Ising-Modell im Pfadintegralformalismus behandelt werden. Es ist ein besonders wichtiges System z.B. in der Festkörperphysik.

2 Begriffe aus der statistischen Physik

Wir betrachten ein kanonisches Ensemble, also die Realisierung aller möglichen Zustände eines Systems mit fester Teilchenzahl N in einem festen Volumen V. Diesen wird von einem umgebenden System („Wärmebad“) eine Temperatur T aufgeprägt. Die Energie kann variieren, nur deren Mittelwert ist festgelegt.
Weiterhin gebe es eine (diskrete) Basis aus normierten Eigenzuständen $\{|n\rangle\}$. Ein möglicher Zustand des Systems wird beschrieben durch $e^{-\beta E_n}$, mit $\beta = 1/k_B T$. Hierbei ist k_B die Boltzmann-Konstante und E_n die Energie des n-ten Eigenzustandes. Die kanonische Zustandssumme als Summe aller möglichen Zustände des Systems ergibt sich dann zu

$$Z(\beta) = \sum_n e^{-\beta E_n} = Tr(e^{-\beta H}) \tag{1}$$

Hierbei ist H der Hamilton-Operator des Systems. Die Wahrscheinlichkeit, das das System in einem bestimmten Zustand ist, genügt der Maxwell-Boltzmann-Verteilung:

$$p_n = \frac{1}{Z} e^{-\beta E_n}$$

Die an einem System gemessenen Werte einer Observablen A sind Mittelwerte:

$$\langle A \rangle \equiv \sum_n p_n \langle n|A|n\rangle \tag{2}$$

$$= \frac{1}{Z}\, Tr(Ae^{-\beta H}) \tag{3}$$

Oftmals lässt sich der gewünschte Mittelwert bereits aus der Zustandssumme bestimmen, und zwar in dem man den Ausdruck $Ae^{-\beta H}$ in der Spur durch eine Ableitung nach β darstellt. Da Spurbildung und Differentiation vertauschen erhält man z.B. für A = H:

$$\langle H \rangle = -\frac{1}{Z}\frac{\partial}{\partial\beta}Z = -\frac{\partial}{\partial\beta}ln(Z)$$

Eine weitere wichtige Größe ist die spezifische Wärme C:

$$C \equiv \frac{1}{N}\frac{\partial\langle H\rangle}{\partial T} \tag{4}$$

Für ein magnetisches System wichtig sind die Netto-Magnetisierung M als Mittelwert der magnetischen Momente und die magnetische Suszeptibilität χ. Letzere ist wie folgt definiert:

$$\chi = \frac{\partial M}{\partial H} \tag{5}$$

wobei H ein anliegendes externes Feld ist. Die Suszeptibilität ist die Responsefunktion des Systems auf eben dieses Feld H.

3 Begriffe aus dem Pfadintegralformalismus

Wir hatten das Pfadintegral als alternative Formulierung der Quantenmechanik eingeführt. Der Propagator K vom Punkt x zur Zeit 0 zum Punkt y zur Zeit T war definiert als

$$K(y,T,x,0) = \left\langle x|e^{-iHT}|y\right\rangle = \int Dx\, e^{iS[x,T]} \tag{6}$$

$$S[x,T] = \int_0^T dt\, \left(\frac{m}{2}\dot{x}^2 - V(x(t))\right) \tag{7}$$

Nützlich ist der Übergang zur euklidischen Zeit T = -$i\tau$, $\tau \in \mathbb{R}$. Dadurch verändert sich der Propagator zu

$$K(y,-i\tau,x,0) = \left\langle x|e^{-H\tau}|y\right\rangle = \int Dx\, e^{-S_E[x,\tau]} \tag{8}$$

$$S_E[x,\tau] = \int_0^\tau dt\, \left(\frac{m}{2}\dot{x}^2 + V(x(t))\right) \tag{9}$$

Als zentrale Größe erwies sich dann das erzeugende euklidische Funktional $Z_E[h]$, wobei h ein (vorerst künstliches) externes Feld ist.

$$Z_E[h] := N\int Dx\, e^{-S_E[x]+\int_{-\infty}^{\infty} dt\, h(t)x(t)} \tag{10}$$

N sei ein Normierungsfaktor.

Man normiert Z im Weiteren mithilfe von Z[0]. So fällt der Faktor N heraus.

Betrachte nun allgemeiner ein vektorielles Feld $\phi(\mathbf{x})$ anstatt x und ein vektorielles externes Feld $\mathbf{h}$ anstatt h:

$Z_E[\mathbf{h}]$ ist so zentral, da seine Ableitungen nach den Komponenten h_i von $\mathbf{h}$ die Korrelationsfunktionen $G^{(n)}_{i_1\cdots i_n}(\mathbf{x}_1\cdots\mathbf{x}_n)$ liefern:

$$G^{(n)}_{i_1\cdots i_n}(\mathbf{x}_1\cdots\mathbf{x}_n) = \frac{1}{Z[0]}\left.\frac{\delta^n Z_E[\mathbf{h}]}{\delta h_{i_1}(\mathbf{x}_1)\cdots\delta h_{i_n}(\mathbf{x}_n)}\right|_{\mathbf{h}=0} \tag{11}$$

In den weiteren Betrachtungen wichtig sind hiervon die Einpunkt- und Zweipunktfunktionen:

$$G^{(1)}_i(\mathbf{x}) = \frac{1}{Z[0]}\left.\frac{\delta Z_E[\mathbf{h}]}{\delta h_i(\mathbf{x})}\right|_{\mathbf{h}=0} = \langle\phi(\mathbf{x})\rangle \tag{12}$$

$$G^{(2)}_{ij}(\mathbf{x}-\mathbf{y}) = \frac{1}{Z[0]}\left.\frac{\delta^2 Z_E[\mathbf{h}]}{\delta h_i(\mathbf{x})\delta h_j(\mathbf{y})}\right|_{\mathbf{h}=0} = \langle\phi_i(\mathbf{x})\phi_j(\mathbf{y})\rangle \tag{13}$$

4 Zusammenhang zwischen Zustandssumme und Pfadintegral

Man kann nun einen Zusammenhang herstellen zwischen der kanonischen Zustandssumme (1) und dem euklidischem erzeugendem Funktional (10). Betrachte dazu den euklidischen Propagator:

$$\begin{aligned}
K(y,-i\tau,x,0) &= \left\langle x|e^{-H\tau}|y\right\rangle \\
&= \langle x|e^{-H\tau}\underbrace{\sum_n |n\rangle\langle n|}_{=1}|y\rangle \\
&= \sum_n e^{-E_n\tau}\langle x|n\rangle\langle n|y\rangle \\
&= \sum_n e^{-E_n\tau}\langle n|y\rangle\langle x|n\rangle
\end{aligned}$$

Zur Erinnerung: Z war definiert als $Z(\beta)=\sum_n e^{-\beta E_n}$. Setze daher x = y, $\tau=\beta$ und integriere über x. Dann erhält man

$$\int dx\ K(x,-i\beta,x,0) = \sum_n e^{-\beta E_n} \langle n| \underbrace{\int dx |x\rangle\langle x|}_{=1} |n\rangle = Z$$

Insgesamt folgt also

$$\int dx\ K(x,-i\beta,x,0) = \int dx \int Dx\, e^{-S_E[x,\tau]} = Z(\beta) \tag{14}$$

Z(β) ist also äquivalent zu $Z_E[0]$ und im Folgenden werden die beiden Begriffe gleichgesetzt. Falls man also für ein gegebenes System Z_E berechnet hat, folgen aus dessen Ableitungen bzw. den Korrelationsfunktionen alle thermodynamischen Größen in Analogie zu Z(β).
Formal kann man also ein D-dimensionales statistisches System durch ein (D+1)-dimensionales euklidisches Feldsystem beschrieben werden. Die inverse Temperatur β geht hier als negative imaginäre Zeit ein.

5 Beispiel: Der harmonische Oszillator

Wir berechnen nun die Zustandssumme des harmonischen Oszillators aus dessen Propagator, den wir bereits durch Pfadintegrale berechnet haben. Das Ergebnis war

$$K(y,T,x,0) = \Big(\frac{m\omega}{2\pi i\ \sin\omega T}\Big)^{1/2} \exp\Big\{i\frac{m\omega}{2\ \sin\omega T}\Big((y^2+x^2)\cos\omega T - 2xy\Big)\Big\}$$

Setze nun x = y und T = -iβ:

$$K(x,-i\beta,x,0) = \Big(\frac{m\omega}{2\pi\ \sinh\omega\beta}\Big)^{1/2} \exp\Big\{-\frac{m\omega x^2}{\sinh\beta\omega}\Big(\cosh\beta\omega - 1\Big)\Big\}$$

Z(β) berechnet sich nun mit (14) zu

$$\begin{aligned}
Z &= \int dx\ K(x,-i\beta,x,0) = \Big(\frac{m\omega}{2\pi\ \sinh\omega\beta}\Big)^{1/2} \sqrt{\pi\Big\{\frac{m\omega}{\sinh\beta\omega}\Big(\cosh\beta\omega-1\Big)^{-1}\Big\}} \\
&= [2(\cosh(\beta\omega)-1)]^{-1/2} = [e^{\beta\omega} + e^{-\beta\omega} - 2]^{-1/2} \\
&= [e^{\beta\omega}(1+e^{-2\beta\omega} - 2e^{-\beta\omega})]^{-1/2} = [e^{\beta\omega}(1-e^{-\beta\omega})^2]^{-1/2} \\
&= [e^{\beta\omega/2}(1-e^{-\beta\omega})]^{-1} = \frac{e^{\beta\omega/2}}{1-e^{-\beta\omega}} \\
&= \sum_{n=0}^{\infty} e^{-\beta(n+1/2)\omega}
\end{aligned}$$

Hierbei wurde das Integral $\int dx\ e^{-a^2x^2} = \sqrt{\pi/a}$, die Definition des $\cosh = \frac{1}{2}(e^x + e^{-x})$ und die geometrische Reihe benutzt.
Wenn man nun $\hbar$ wieder einsetzt erhält man das bekannte Resultat aus der Statistik

$$Z = \sum_{n=0}^{\infty} e^{-\beta(n+1/2)\hbar\omega}$$

6 Phasenübergänge

Ein wichtiges Gebiet in der Statistik ist die Untersuchung von Phasenübergängen. Diese kommen in vielen unterschiedlichen Gebieten vor, so z.B. in der klassischen Thermodynamik als auch in der Quantenchromodynamik. Die obigen Ergebnissen erlauben nun Phasenübergänge mit Pfadintegralen bzw. feldtheoretischen Mitteln zu untersuchen. Betrachte hierzu ein magnetisches System welches einen Phasenübergang zweiter Ordnung habe. Bei diesem sind die ersten Ableitungen der Variablen stetig, die zweiten divergieren jedoch. Es gibt bei magnetischen Stoffen die Curie-Temperatur T_C, unterhalb welcher sich der Stoff spontan mangnetisieren kann, die Magnetisierung M $\neq 0$ ist. Oberhalb der Temperatur ist dem nicht so, daher spricht man beim Übergang von $T < T_C$ nach $T > T_C$ von einem Phasenübergang und bei T_C von einem kritischen Punkt. M heißt auch Ordnungsparameter, da sie oberhalb des kritischen Punktes verschwindet.
Dies ist gleichzeitig ein Beispiel für spontane Symetriebrechung, da die Drehinvarianz des Systems unterhalb der Curie-Temperatur für M nicht mehr gilt. Auch hier sieht man also bereits mögliche Analogien zwischen Statistik und Feldtheorie.
Es gibt bereits theoretische Beschreibungen von Phasenübergängen, die sogenannten „Klassischen Theorien“. Sie beschreiben das Verhalten des Systems direkt um kritische Punkte herum durch Potenzgesetze. Die Exponenten heißen kritische Exponenten, sie sind alle positiv.

$$C \sim \begin{array}{ll} A_+|T-T_C|^{-\alpha} & T > T_C \\ A_-|T-T_C|^{-\alpha'} & T < T_C \end{array}$$

$$M \sim |T-T_C|^{\beta}$$

$$\chi \sim \begin{array}{ll} C_+|T-T_C|^{-\gamma} & T > T_C \\ C_-|T-T_C|^{-\gamma'} & T < T_C \end{array}$$

Diese Gesetze gelten falls kein externes Feld h angelegt ist, was bei diesen Betrachtungen immer der Fall sein wird.

Weiterhin kann man die Korrelationslänge ξ definieren, sie gibt die Reichweite der Korrelation, also der Wechselwirkung, im System an.

$$\xi \sim \begin{array}{ll} f_+(T-T_C)^{-\nu} & T > T_C \\ f_-(T-T_C)^{-\nu'} & T < T_C \end{array}$$

In der Nähe des kritischen Punktes divergiert sowohl ξ als auch χ!
Die kritischen Exponenten genau zu kennen ist sehr vorteilhaft, da sie nach der Universalitätshypothese in fast allen physikalischen Systemen gleich sind. Sie hängen nur von der Dimension des Systems, der zugrundeliegenden Symetrie und der Spindimensionalität (bei magnetischen Systemen) ab. Das bedeutet, das so unterschiedliche Systeme wie Magneten oder Flüssigkeiten unter gewissen Voraussetzungen äquivalent beschrieben werden können. Weiterhin wichtig in diesem Zusammenhang ist die Skalenhypothese, nach welcher das System um den kritischen Punkt herum selbstähnlich beschrieben werden kann.
Die klassischen Theorien liefern z.B. für die kritischen Exponenten $\nu, \nu', \gamma, \gamma'$ in verschiedenen Näherungen die Werte

	Molekularfeld-näherung	Ising Modell d=2	Ising Modell d=3
ν, ν'	$\frac{1}{2}$	1	0,63
γ, γ'	1	$\frac{7}{4}$	1,25

Im Folgenden wird nun versucht, diese Exponenten mit Pfadintegralen herzuleiten.

7 Das Ising-Modell

Das Ising-Modell ist das einfachste magnetische System. Es besteht aus einem symetrischem Gitter von N ortsfesten Spins s_i, i = 1 $\cdots$ N. Jeder von diesen kann den Wert ± 1 annehmen und das Gitter habe die Gitterkonstante a. Es gebe periodische Randbedingungen, also $s_i = s_{i+N}$. Desweiteren sei das System translationsinvariant und spiegelsymetrisch. Die Dimension sowie die genaue Art der Wechselwirkung wird erst später festgelegt.
Die Anzahl $\{s_i\}$ der verschiedenen Spinkonfigurationen ist 2^N. Bei einem anliegenden externen Feld **h** ergibt sich die Energie dieser Konfiguration zu

$$E(\{s_i\}) = -\sum_{i,j} J_{ij} s_i s_j - \sum_i h_i s_i \tag{15}$$

Die Konstante J_{ij} gibt die Stärke der Kopplung an und begünstigt entweder ferromagnetische Kopplung der Spins (parallel) oder antiferromagnetische Kopplung (antiparalle Spins), je nachdem ob sie positiv oder negativ

ist.
Ein möglicher Zustand des Systems ist dann

$$p(\{s_i\}) = e^{-\beta E(\{s_i\})} = e^{\sum_{i,j} K_{ij} s_i s_j + \sum_i H_i s_i} \tag{16}$$

wobei der Einfachheit halber $K_{ij} = \beta J_{ij}$ und $H_i = \beta h_i$ definiert wurden.
Die Zustandssumme ist dann:

$$Z[H] = \sum_{\{s_i\}} e^{-\beta E(\{s_i\})} = \sum_{\{s_i\}} e^{\sum_{i,j} K_{ij} s_i s_j + \sum_i H_i s_i} \tag{17}$$

Wir möchten nun beispielhaft die bereits oben erwähnten Systemeigenschaft M, χ ind ξ berechnen und dabei Pfadintegrale benutzen. Als Vereinfachung wird angenommen, das in allen Gitterpunkten dasselbe Feld anliegt: $H_i = H \ \forall$ i.
Die Magnetisierung des i-ten Gitterpunktes $\langle s_i \rangle$ ergibt sich aus dem erzeugendem Funktional bzw. der Zustandssumme gemäß:

$$\langle s_i \rangle = \frac{1}{Z[0]} \left. \frac{\delta Z[\mathbf{H}]}{\delta H_i} \right|_{\mathbf{H}=0} \tag{18}$$

Die Netto-Magnetisierung M des gesamten Gitters ist definiert als:

$$\begin{aligned} M &= \frac{1}{N} \sum_i \langle s_i \rangle = \frac{1}{N} \sum_i \frac{1}{Z[0]} \left. \frac{\delta Z[\mathbf{H}]}{\delta H_i} \right|_{\mathbf{H}=0} \\ &\equiv \frac{1}{N} \frac{1}{Z[0]} \left. \frac{\delta Z[\mathbf{H}]}{\delta \mathbf{H}} \right|_{\mathbf{H}=0} \end{aligned} \tag{19}$$

Die Suszeptibilität χ ergibt sich gemäß (23) zu:

$$\begin{aligned} \chi &= \frac{\partial M}{\partial \mathbf{H}} = \frac{1}{N} \frac{\partial}{\partial \mathbf{H}} \frac{1}{Z[0]} \left. \frac{\delta Z[\mathbf{H}]}{\delta \mathbf{H}} \right|_{\mathbf{H}=0} \\ &= \frac{1}{N} \sum_{ij} \frac{\partial}{\partial H_j} \left\{ \frac{1}{Z[0]} \left. \frac{\delta Z[\mathbf{H}]}{\delta H_i} \right|_{\mathbf{H}=0} \right\} \\ &= \frac{1}{N} \sum_{ij} \left\{ \frac{1}{Z[0]} \left. \frac{\delta^2 Z[\mathbf{H}]}{\delta H_i \delta H_j} \right|_{\mathbf{H}=0} - \left(\frac{1}{Z[0]} \left. \frac{\delta Z[\mathbf{H}]}{\delta H_i} \right|_{\mathbf{H}=0} \right)^2 \right\} \end{aligned} \tag{20}$$

Der Vergleich mit den Korrelationsfunktionen ergibt:

$$M = \frac{1}{N} \sum_i G_i^{(1)}(r_i) \tag{21}$$

$$\chi = \frac{1}{N} \sum_{ij} G_{ij}^{(2)}(r_i - r_j) \tag{22}$$

wobei r_i den Ort des i-ten Spins beschreibt. Mit der oben geforderten Translationsinvarianz kann man χ noch weiter vereinfachen, indem man willkürlich einen Spin auswählt und alle Korrelationsfunktionen in Abhängigkeit vom Ort dieses Spins beschreibt. Definiere daher einen zum Ort dieses Spins relativen Ortsvektor **R**. Damit fällt die Summe über einen der beiden Parameter i und j weg. Der übrig gebliebene fällt aber wiederrum aufgrund der Translationsinvarianz weg, da der vorhin ausgewählte Spin beliebig war. Die Summe liefert einen Faktor N. Hiermit vereinfacht sich (22) zu

$$\chi = \sum_{\mathbf{R}} G(\mathbf{R}) \tag{23}$$

8 Berechnung der Zustandssumme

Um Z nun mithilfe von Pfadintegralen zu berechnen betrachten wir allgemein das Integral

$$\begin{aligned}
\int_{-\infty}^{\infty} \exp\big(-\frac{1}{4a^2}x^2 + sx\big)\, dx &= \int_{-\infty}^{\infty} \exp -\frac{1}{4a^2}(x^2 - 4a^2 sx)\, dx \\
&= \int_{-\infty}^{\infty} \exp -\frac{1}{4a^2}\Big((x-2a^2s)^2 + 4s^2a^4\Big)\, dx \\
&= \exp(4s^2a^4)\int_{-\infty}^{\infty} \exp -\frac{y^2}{4a^2} dy \\
&= K\exp(a^2s^2)
\end{aligned}$$

Hierbei wurde wie oben das gaußsche Standardintegral verwand, es ergibt die Konstante K. Dieses Ergebniss kann man nun weiter verallgemeinern:

$$\int_{-\infty}^{\infty}\prod_{i=1}^{N} dx_i \exp\big(-\frac{1}{4}x_i V_{ij}^{-1}x_j + s_i x_i\big) \;=\; K\exp(s_i V_{ij} s_j)$$

V_{ij} ist eine symmetrische, positiv definite Matrix. Es gilt die Einstein'sche Summenkonvention *. In dieser „Hubbard-Transformation“ haben wir, auf das Ising-Modell bezogen, die gekoppelten Spins s_i auf der rechten Seite entkoppelt und stattdessen mit den Integrationsvariablen x_i verbunden. Außerdem sind wir von diskreten Variablen s_i zu kontinuierlichen x_i übergegangen, was ja gebraucht wird bei einer Feldbeschreibung.
Für die Zustandssumme folgt damit

$$\begin{aligned}
Z[H] &= \sum_{\{s_i\}} e^{K_{ij}s_is_j + H_is_i} \\
&= \sum_{\{s_i\}}\int_{-\infty}^{\infty}\prod_{i=1}^{N} dx_i \exp\big(-\frac{1}{4}x_iK_{ij}^{-1}x_j + (x_i+H_i)s_i\big)
\end{aligned}$$

Da nur der hintere Teil von s_i abhängt, kann man Summe und Integral vertauschen

$$= \int_{-\infty}^{\infty} \prod_{i=1}^{N} dx_i \exp\big(-\frac{1}{4} x_i K_{ij}^{-1} x_j\big) \sum_{\{s_i\}} \exp\Big((x_i + H_i) s_i\Big)$$

Dieser Ausdruck wird nun vereinfacht und auf eine Form gebracht, die man mit bekannten Ergebnissen der Feldtheorie vergleichen kann.
Da $s_i = \pm 1$ gilt

$$\sum_{\{s_i\}} \exp(H_i s_i) = \sum_i \exp(H_i - H_i) = N = const.$$

Diese Konstante ist im weiteren Verlauf unerheblich und kann ignoriert werden. Die zweite Summe kann ebenfalls ausgewertet werden

$$\begin{aligned}
\sum_{\{s_i\}} \exp(x_i s_i) &\overset{*}{=} \sum_i \exp\Big(\sum_i x_i - x_i\Big) = \sum_i \prod_i \exp(x_i - x_i) \\
&= \sum_i \prod_i 2\cosh(x_i) \overset{*}{=} \prod_i 2\cosh(x_i) \\
&= \exp\Big(\sum_i \ln(\cosh x_i)\Big)
\end{aligned}$$

Um später die Analogie zur Feldtheorie sehen zu können vollziehen wir noch eine Koordinatentransformation $x_i \to x_i - H_i$. Der vordere Teil des Exponenten ergibt sich dann zu

$$\begin{aligned}
-\frac{1}{4} x_i K_{ij}^{-1} x_j &\to -\frac{1}{4}(x_i - H_i) K_{ij}^{-1} (x_j - H_j) \\
&= -\frac{1}{4}\Big(x_i K_{ij}^{-1} x_j - H_i K_{ij}^{-1} x_j - x_i K_{ij}^{-1} H_j + H_i K_{ij}^{-1} H_j\Big)
\end{aligned}$$

Mit einer weiteren Transformation führen wir das Feld ψ_i ein:

$$\psi_i = \frac{1}{2} K_{ij}^{-1} x_j \tag{24}$$

Man erhält dann insgesamt

$$\begin{aligned}
-\frac{1}{4} x_i K_{ij}^{-1} x_j &\to -\Big(\psi_i K_{ij} \psi_j - \frac{1}{2} H_i \psi_j - \frac{1}{2} \psi_i H_j + H_i K_{ij}^{-1} H_j\Big) \\
&= -\Big(\psi_i K_{ij} \psi_j - H_i \psi_i + H_i K_{ij}^{-1} H_j\Big)
\end{aligned}$$

Nach all diesen Umformungen stellt sich die Zustandssumme dar als

$$\begin{aligned}
Z[H] &\approx \exp(-H_i K_{ij}^{-1} H_j) \\
&* \int Dx \exp\big(-\sum_i \psi_i K_{ij} \psi_j + (\ln(\cosh 2K_{ij}\psi_j)) + H_i \psi_i\Big)
\end{aligned}$$

Hier erkennt man bereis eine bis auf einen Vorfaktor strukturelle Analogie zum oben definiertem erzeugendem Funktional. Wichtig hierbei war der Übergang von einer dikreten zu einer kontinuierlichen Beschreibung der einzelnen Gitterpunkte.

9 Näherung: Freie Theorie

Es wird nun versucht, Z mit bereits Bekanntem in Verbindung zu bringen, indem man den Integranden als euklidische Wirkung schreibt. Benutze die Entwicklung des ln cosh x

$$\ln\cosh x \quad \approx \quad \frac{1}{2}x^2 - \frac{1}{12}x^4 + \cdots :$$

$$Z[H] \quad \approx \quad \int Dx \exp\sum_i \Big(-\psi_i K_{ij}\psi_j + \frac{1}{2}(2K_{ij}\psi_j)^2 - \frac{1}{12}(2K_{ij}\psi_j)^4 + H_i\psi_i\Big)$$

Für ein freies skalares Feld ϕ_i wurde bereits die Lagrangedichte unter Einfluss eines externen Feldes h hergeleitet

$$\mathcal{L} = A_0(\nabla\phi_i)^2 + A_1\phi_i^2 + A_2\phi_i^4 + h\phi_i \tag{25}$$

Durch Vergleich sieht man, das Z bis auf einen Vorfaktor nun genau dem erzeugenden Funktional mit der Lagrangedichte eines Feldes ψ entspricht. Hierbei übernimmt die Matrix K_{ij} die Rolle der Ableitungen.
Das Ziel ist es, $\mathcal{L}$ durch kontinuierliche Felder ϕ zu beschreiben:

$$Z[H] \quad \sim \quad \int D\phi\ \exp\Big(-\int \mathcal{L}[\phi, H]\Big) \tag{26}$$

In erster Näherung betrachtet man nun nur den freien Teil, vernachlässigt also den ψ^4-Term und erstmal auch das externe Feld H. Die (kontinuierliche) Lagrangedichte dieser Näherung sei $\mathcal{L}_0$. Es ist dann

$$\int \mathcal{L}_0 = \sum_i \psi_i K_{ij}\psi_j - 2(K_{ij}\psi_j)^2 \tag{27}$$

Jetzt transformieren wir ψ_i und K_{ij} in den Fourierraum:

$$\psi_i \equiv \psi(\mathbf{r}_i) = \frac{1}{\sqrt{N}}\sum_{\mathbf{k}} \exp(-i\mathbf{k}\mathbf{r}_i)\psi(\mathbf{k}) \tag{28}$$

$$K_{ij} \equiv K(\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j) = \frac{1}{N}\sum_{\mathbf{k}} \exp\Big[-i\mathbf{k}(\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j)\Big] K(\mathbf{k}) \tag{29}$$

Die **k**‘s entsprechen den reziproken Gittervektoren innerhalb der ersten Brillouin-Zone.

Dann gilt:

$$\begin{aligned}
\psi_i K_{ij} \psi_j &= \sum_{\mathbf{k}} K(\mathbf{k}) \psi(\mathbf{k}) \psi(-\mathbf{k}) \\
2 \sum_i (K_{ij} \psi_j)^2 &= 2 \sum_{\mathbf{k}} K(\mathbf{k}) \psi(\mathbf{k}) K(-\mathbf{k}) \psi(-\mathbf{k}) \\
&= 2 \sum_{\mathbf{k}} |K(\mathbf{k})|^2 \psi(\mathbf{k}) \psi(-\mathbf{k})
\end{aligned}$$

(27) wird dann zu

$$\int \mathcal{L}_0 = \sum_{\mathbf{k}} \Big[K(\mathbf{k}) - 2|K(\mathbf{k})|^2 \Big] \psi(\mathbf{k}) \psi(-\mathbf{k}) \tag{30}$$

Diese Lagrangedichte wird nun weiter ausgewertet. Wegen der Spiegelsymetrie werden im Folgenden nur gerade Terme beibehalten. $K(\mathbf{k})$ wird in $|k|$ entwickelt und diese nach der zweiten Ordnung abbrechen. Dies ist zulässig, da die höheren Terme hinterher herausfallen würden.

$$K(\mathbf{k}) = K_0(1 - \rho^2 k^2)$$

Für die Lagrangedichte ergibt sich dann

$$\int \mathcal{L}_0 = \sum_{\mathbf{k}} K_0 \Big[(1 - 2K_0) + (4K_0 - 1)\rho^2 k^2 \Big] \psi(\mathbf{k}) \psi(-\mathbf{k}) \tag{31}$$

Transformiere $K(\mathbf{k})$ nun zurück

$$\begin{aligned}
K(\mathbf{k}) &= \sum_{\mathbf{R}} K(\mathbf{R}) \exp(i\mathbf{k}\mathbf{R}) \\
&\approx \sum_{\mathbf{R}} K(\mathbf{R}) \Big[1 + \frac{1}{2}(i\mathbf{k}\mathbf{R})^2 + \cdots \Big] \\
\Rightarrow \qquad & K_0(1 - \rho^2 k^2) \approx \sum_{\mathbf{R}} K(\mathbf{R}) \Big[1 - \frac{1}{2}(\mathbf{k}\mathbf{R})^2 \Big]
\end{aligned} \tag{32}$$

Bis hierhin wurde die genaue Wechselwirkung der Komponenten nicht spezifiziert. Im Folgenden sollen nun nur noch direkte Nachbarn miteinander wechselwirken. Ein Spin habe γ Nachbarn im Abstand a. Dann ist der oben definierte relative Abstand $\mathbf{R} \approx a$.

Oben war $K_{ij} = \beta J_{ij}$ definiert worden. Durch Koeffizientenvergleich ergibt sich nun

$$K_0 = \sum_{\mathbf{R}} K(\mathbf{R}) = \gamma\beta J_0 \tag{33}$$

$$K_0 \rho^2 k^2 = \frac{1}{2}\sum_{\mathbf{R}} K(\mathbf{R})(\mathbf{kR})^2 \approx K_0 a^2 k^2 \tag{34}$$

Also ist $\rho \approx$ a. Man erkennt, dass bei einem bestimmten K_0, nämlich bei

$$K_0 = \gamma\beta J_0 = \gamma J_0 \frac{1}{k_B T_0} \tag{35}$$

$$T_0 = 2\gamma J_0 \frac{1}{k_B} \tag{36}$$

Die Dichte für k = 0 verschwindet und somit die freie Theorie instabil wird. T_0 ist also die Temperatur bei der ein Phasenübergang stattfindet. Entwickle deswegen die einzelnen Terme um T_0 herum:

$$\begin{aligned} 1 - 2K_0 &= \frac{T - T_0}{T_0} + \mathcal{O}(T - T_0)^2 \\ 4K_0 - 1 &= 1 + \ \mathcal{O}(T - T_0) \\ K_0 &= \frac{1}{2} + \ \mathcal{O}(T - T_0) \end{aligned}$$

Mit den weiteren Definitionen

$$\phi = \rho\psi \tag{37}$$

$$\mu^2 = \frac{1}{\rho^2}\frac{T - T_0}{T_0} \tag{38}$$

ergibt sich schließlich

$$\int \mathcal{L}_0 = \frac{1}{2}\sum_{\mathbf{k}} (k^2 + \mu^2)\phi(\mathbf{k})\phi(-\mathbf{k}) \tag{39}$$

Das sieht der Klein-Gordon-Dichte schon sehr ähnlich. Man transformiert nur noch zurück in den Ortsraum gemäß (28). Hierbei benutzt man den „Trick“

$$k e^{-ikr}\phi(\mathbf{k}) = i\nabla_r e^{-ikr}\phi(\mathbf{k})$$

um die Ableitungen hineinzubekommen und

$$\sum_i \ F\Big(\phi(\mathbf{r_i})\Big) \rightarrow \int \ dx \ a^{-d} \ \ F\Big[\phi(x)\Big] \tag{40}$$

um die Summe in ein Integral umzuwandeln. Beim Letzteren wurde das Gitter sozusagen „verkontinuierlicht“ indem das Volumen V des Systems gegen ∞ geht, es wird also im Prinzip der thermodynamische Limes betrachtet.

$$\int dx\ \mathcal{L}_0 = \frac{1}{2}\int\ dx\ \Big[(\nabla\phi)^2 + \mu^2\phi^2\Big] \tag{41}$$

Dieses Resultat kennt man bereits aus der freien skalaren Theorie. Wir haben also die Berechnung der Zustandssumme eines (diskreten) d-dimensionalen Ising-Systems auf die (kontinuierliche) freie Klein-Gordon-Theorie angenähert. Die „Masse“ μ^2 ist hierbei linear in der Temperatur und verschwindet im kritischen Punkt, d.h. dort hat man eine masselose Theorie.

10 Berechnung von M, χ und ξ

Die Berechnung wird im Fourierraum durchgeführt werden, wir starten also mit (39). Wir fügen nun das externe Feld H wieder hinzu. Das erzeugende Funktional ist dann

$$Z[H] \quad \approx \quad \int D\phi \exp\Big(-\frac{1}{2}\sum_{\mathbf{k}}(k^2+\mu^2)\phi(\mathbf{k})\phi(-\mathbf{k}) + H(\mathbf{k})\phi(-\mathbf{k})\Big)$$

Bevor man nun weitergeht, kann man durch die Koordinatentransformation

$$\begin{aligned} \phi(\mathbf{k}) \quad &\rightarrow \quad \phi(\mathbf{k}) - (k^2+\mu^2)^{-1}H(\mathbf{k}) \\ D\phi \quad &\rightarrow \quad D\phi \end{aligned}$$

das Funktional zu

$$\begin{aligned} Z[H] \quad &\approx \quad \int D\phi \exp\Big(-\frac{1}{2}\sum_{\mathbf{k}}(k^2+\mu^2)\phi(\mathbf{k})\phi(-\mathbf{k})\Big) \\ &* \quad \exp\Big(\frac{1}{2}\sum_{\mathbf{k}}(k^2+\mu^2)^{-1}H(\mathbf{k})H(-\mathbf{k})\Big) \end{aligned}$$

vereinfachen. Der hintere Term hängt gar nicht mehr von ϕ ab, der vordere aber auch nicht mehr von H. Der Nutzen dieser Transformation ist, dass das Integral gar nicht berechnet werden muss, da die Ableitung nach H nur auf den hinteren Term wirkt. Das Integral kürzt sich gerade in der Korrelationsfunktion heraus.

Die Magnetisierung M ergibt sich aus den Einpunktfunktionen bzw. einmaliger Ableitung nach H. Das ergibt

$$
\begin{aligned}
M &\sim \frac{\delta}{\delta H(\mathbf{k})} \exp\Big(\frac{1}{2}\sum_{\mathbf{k}}(k^2+\mu^2)^{-1}H(\mathbf{k})H(-\mathbf{k})\Big)\Big|_{H=0} \\
&\approx H(-\mathbf{k}) \exp\Big(\frac{1}{2}\sum_{\mathbf{k}}(k^2+\mu^2)^{-1}H(\mathbf{k})H(-\mathbf{k})\Big)\Big|_{H=0} \\
&= 0
\end{aligned}
$$

Die Magnetisierung ist also immer Null, selbst wenn man unterhalb der kritischen Temperatur ist. Es ist aber nicht verwunderlich, das die gemachte Näherung dies nicht beschreibt. Spontane Symetriebrechung kann bei skalaren Feldern erst durch die Selbstwechselwirkung, also den ϕ^4-Term beschrieben werden.
Um χ zu bekommen, müssen wir die Zweipunktfunktion berechnen

$$
G_0^{(2)}(\mathbf{k}) = \frac{1}{Z^0[0]} \frac{\delta^2 Z^0[\mathbf{H}]}{\delta H(\mathbf{k})\delta H(-\mathbf{k})}\Big|_{\mathbf{H}=0}
$$

Wenn man nun die Korrelationsfunktion berechnet ergibt sich

$$
G_0^{(2)}(\mathbf{k}) = (k^2+\mu^2)^{-1} \tag{42}
$$

Dieses Ergebnis kennt man bereits. Wenn man (42) in den Ortsraum zurücktransformiert erhält man den Feynman-Propagator.
χ ergibt sich gemäß (23) gerade zur Zweipunktfunktion im Impulsraum an der Stelle k=0:

$$
\chi = G_0^{(2)}(\mathbf{k}=0) = \mu^{-2} \tag{43}
$$

Weiterhin ist die Korrelationslänge definiert als

$$
\begin{aligned}
\xi^2 &= \frac{\int r^2 G(r) dr}{\int G(r) dr} \\
&= \Big[-\frac{\partial}{\partial k^2}G(k)\Big]\Big/G(k)\Big|_{\mathbf{k}=0} \\
&= 2\mu^{-2}
\end{aligned} \tag{44}
$$

Die Definition von μ^2 benutzend haben wir insgesamt gezeigt

$$
\chi \sim |T-T_0|^{-1} \tag{45}
$$

$$
\xi \sim |T-T_0|^{-1/2} \tag{46}
$$

Man erhält diesselben kritischen Exponenten wie in der Molekularfeldnäherung.
Außerdem erkennt man, dass beim kritischen Punkt χ und ξ divergieren.

11 Zusammenfassung und Ausblick

Es ist gezeigt worden, das die Zustandssumme Z(β) eines kanonischen statistischen Systems

$$Z(\beta) = \sum_n e^{-\beta E_n} = Tr(e^{-\beta H})$$

mit dem euklidischen erzeugenden Funktional Z_E

$$Z_E[j] := N \int Dx\, e^{-S_E[x] + \int_{-\infty}^{\infty} dt\, j(t) x(t)}$$

identifiziert werden kann. Hierdurch ist es möglich, statistische Systeme mit Pfadintegral- bzw. feldtheoretischen Methoden auszuwerten.
Dieses wurde am Beispiel des Ising-Systems vorgeführt. In erster Näherung kann man es als freie Feldtheorie behandeln. Bei der Auswertung bezüglich der kritischen Exponenten bekommt man die klassischen Ergebnisse aus der Molekularfeldnäherung.
Es liegt nahe, die Berechnung nicht nur auf die freie Theorie zu beschränken, sondern weitere Ordnungen zu betrachten. Aber schon bei der spezifischen Energie C in der freien Theorie bekommt man Divergenzen und muss Renormalisierungstheorie anwenden. Dies liegt daran, dass das Integral, was oben durch geschickte Transformation nicht berechnet werden musste, nun zu berechnen ist.
Von besonderem Interesse könnte hier die Lösung des 3D-Isingsystems sein, welches bisher nur in 1D und 2D geschlossen gelöst wurde.
Abschließend kann man die hier gezogene Analogie zwischen magnetischen Systemen und euklidischer Feldtheorie noch weiter führen und eine Art Übersetzungsvorschrift geben:

Euklidische Feldtheorie	**Magnetische Systeme**
Felder	Spinvariablen
Quelle	Magnetisches Feld
Euklidische Wirkung	Energie der Systemkonfiguration
Funktionalintegral	Summe über Spinkonfigurationen
Vakuumerwartungswert	Magnetisierung
Null-Impuls Zweipunktfunktion	Suszeptibilität
Masse	Inverse Korrelationslänge
Masselose Theorie	Kritische Theorie
Erzeugendes Funktional Z	Zustandssumme

12 Literaturliste

- J. Zinn-Justin; *Quantum Field Theory and Critical Phenomena*, Oxford Science Publications, 1977
- D.J. Amit, V. Mahin-Mayer; *Field Theory, the Renormalization Group and Critical Phenomena*, World Scientific, 2005
- A. Das; *Field Theory - A Path Integral Approach*, World Scientific, 1993
- R. MacKenzie; *Path Integral Methods and Applications*, 2000 $http://arxiv.org/PS_cache/quant-ph/pdf/0004/0004090v1.pdf$
- W. Nolting; *Grundkurs Theoretische Physik 6: Statistische Physik*, Springer, 2005