

LÖSUNG DES ZWEIDIMENSIONALEN
ISING-MODELLS MITTELS
GRASSMANN-VARIABLEN UND DER
RENORMIERUNGSGRUPPE

BACHELORARBEIT
zur Erlangung des akademischen Grades
BACHELOR OF SCIENCE

Westfälische Wilhelms-Universität Münster
Fachbereich Physik
Institut für theoretische Physik

Prüfer:

PD Dr. Jochen Heitger

Prof. Dr. Gernot Münster

Eingereicht von:

Matthias Post

Münster, September 2014

Zusammenfassung

Das Ising-Modell ist ein theoretisches Modell der statistischen Physik, das den Phasenübergang eines Ferromagneten bei Erreichen einer kritischen Temperatur beschreibt. Die Zustandssumme des zweidimensionalen quadratischen Modells wird mithilfe von antikommutierenden Variablen (Grassmann-Variablen) gelöst und daraus die freie Energie und die kritische Temperatur berechnet. Anschließend werden sog. Renormierungsgruppen-Methoden angewendet, um die kritische Temperatur im Vergleich mit dem analytischen Ergebnis numerisch zu bestimmen.

Diese Fassung der Arbeit unterscheidet sich nur geringfügig von der am 9. September 2014 dem Prüfungsamt vorgelegten Version.

The Ising model is a model of statistical physics which describes the phase transition of a ferromagnet reaching a critical temperature. The partition function of the two-dimensional square-lattice Ising model will be solved by use of anticommutating variables (Grassmann variables) and from this, the free energy and the critical temperature will be calculated. Then, renormalization-group methods will be used to numerically compute the critical temperature in comparison to the analytic value.

This version of the bachelor thesis has only minor differences to the version handed in on September 9th, 2014.

Eidesstattliche Erklärung

Hiermit versichere ich, Matthias Post, dass ich die vorliegende Arbeit selbstständig verfasst und keine anderen als die angegebenen Quellen und Hilfsmittel verwendet habe. Gedanklich, inhaltlich oder wörtlich übernommenes habe ich durch Angabe von Herkunft und Text oder Anmerkung belegt bzw. kenntlich gemacht. Dies gilt in gleicher Weise für Bilder, Tabellen, Zeichnungen und Skizzen, die nicht von mir selbst erstellt wurden.

Alle auf der CD beigefügten Programme sind von mir selbst programmiert worden.

Münster, 9. September 2014

Matthias Post

Inhaltsverzeichnis

1. Einleitung	1
2. Grundlagen	3
2.1. Hamilton-Operator des Ising-Modells	3
2.2. Grundlagen der statistischen Physik	6
3. Analytische Lösung durch Graßmann-Variablen	8
3.1. Hochtemperatur-Entwicklung	8
3.2. Graßmann-Variablen	11
3.3. Darstellung des Ising-Modells durch Graßmann-Variablen	15
3.4. Berechnung der Zustandssumme	23
3.5. Freie Energie	25
4. Numerische Berechnung der kritischen Temperatur	27
4.1. Renormierungsgruppe	27
4.2. Nur Nächstnachbar-Wechselwirkungen	30
4.3. Wechselwirkung der übernächsten Nachbarn	32
4.4. Blockspin-Transformation mittels Mehrheitsregel	34
5. Fazit	40
A. Beispielpolygone	41
B. Nebenrechnungen	44
B.1. Quantenmechanisches Pfadintegral	44
B.2. Vorfaktoren a	45
B.3. Fouriertransformation	46

1. Einleitung

Das **Ising-Modell** ist ein wichtiges und eingehend untersuchtes Modell der statistischen Physik. Es beschreibt ein Viel-Teilchen-System als ein Gitter mit N Gitterpunkten, an dem sich jeweils ein magnetisches Moment σ_i befindet, das nur die Einstellmöglichkeiten 1 („up“) oder -1 („down“) besitzt. Es wird klassisch durch die **Hamilton-Funktion**

$$H = - \sum_{i,j} J_{i,j} \sigma_i \sigma_j - \mu B_0 \sum_i \sigma_i \quad (1.1)$$

beschrieben. [Nol6] $J_{i,j}$ ist eine Kopplungskonstante, mit deren Stärke die einzelnen sog. **Ising-Spins** σ_i wechselwirken. Der zweite Term kommt bei Einbringung eines externen Magnetfeldes B_0 hinzu, in dessen Richtung die z -Achse definiert wurde.

Interessant am Ising-Modell ist die Vorhersage eines **Phasenübergangs Ferro-Paramagnet** bei einer **kritischen Temperatur** T_c . Die Energie ist minimal, wenn alle Ising-Spins gleichgerichtet sind. Für $T < T_c$ handelt es sich um einen Ferromagneten. Für $T > T_c$ besitzt der Stoff dagegen paramagnetische Eigenschaften, da die Spins zufällig verteilt sind und nur von B_0 ausgerichtet werden.

Das Modell wurde nach E. Ising benannt, der 1925 das Modell im Eindimensionalen löste. [Isi] Das eindimensionale Ising-Modell weist jedoch keinen Phasenübergang auf. Erst 1944 wurde das zweidimensionale Ising-Modell ohne B_0 -Feld von L. Onsager mit der sog. Transfermatrix-Methode gelöst, welches einen Phasenübergang bei der kritischen Temperatur $k_B T_c = 2,27J$ vorhersagt. [Ons] Für das dreidimensionale Modell existiert bislang keine exakte Lösung.

Diese Arbeit befasst sich mit der Lösung des zweidimensionalen Ising-Modells ohne externem Magnetfeld B_0 . Nachdem in Kapitel 2 die Hamilton-Funktion des Modells etwas genauer behandelt wird und die notwendigen Mittel der statistischen Physik wiederholt werden, wird in Kapitel 3 eine weitere Methode besprochen, um die Zustandssumme Z des zweidimensionalen Ising-Modells herzuleiten: Es zeigt sich, dass sich Z als Summe über alle möglichen Polygone, die sich auf dem Ising-Gitter zeichnen lassen, schreiben lässt. Sog. antikommutierende **Graßmann-Variablen** dienen dazu, diese Zustandssumme in eine einfache Form eines Pfadintegrals zu bringen. Diese lässt sich mithilfe einer Fouriertransformation lösen, sodass wir die berühmte Onsager-Lösung

$$Z(\beta) = 2^N \cosh^{2N}(\beta J) \sqrt{\prod_{n,m} [(1+t^2)^2 - 2t(1-t^2)(\cos p_x + \cos p_y)]} \quad (1.2)$$

erhalten. Die freie Energie errechnet sich schließlich durch den Übergang in die Thermodynamik.

Kapitel 4 widmet sich der **Renormierungsgruppe**. Das Ising-Gitter lässt sich wiederum auf ein kleineres Gitter abbilden, da die Spins nahe der kritischen Temperatur sehr stark zueinander korreliert sind und sich daher Blöcke von Spins zu einem einzigen zusammenfassen lassen. Da bei der Entfernung von Spins neue Wechselwirkungen zwischen den übrigen hinzukommen, müssen geeignete Approximationen gefunden werden, die in den Unterkapiteln behandelt und diskutiert werden.

2. Grundlagen

2.1. Hamilton-Operator des Ising-Modells

Der Hamilton-Operator H eines Systems aus N Elektronen ist in seiner ursprünglichen Form für unsere Zwecke unbrauchbar. Wir können diesen jedoch als einen effektiven Austauschoperator H_s umschreiben. Hierbei wird den Ausführungen in [NoIM1] gefolgt.

Betrachte als Minimalbeispiel den Hamilton-Operator eines 2-Elektronen-System

$$H = \frac{1}{2m} \left(\vec{P}_1^2 + \vec{P}_2^2 \right) + V(\vec{Q}_1, \vec{Q}_2). \quad (2.1)$$

Da dieser spinunabhängig ist, lassen sich Orts- und Spinfunktion separieren:

$$|\psi\rangle = |q\rangle \cdot |s, m_s\rangle \quad (2.2)$$

mit der Eigenwertgleichung

$$H |q\rangle_{\pm} = E_{\pm} |q\rangle_{\pm}. \quad (2.3)$$

Der Gesamtspin s kann 1 und 0 betragen, wodurch sich drei symmetrische ($m_s = -1, 0, 1$) und eine antisymmetrische ($m_s = 0$) Spinfunktion und damit die total antisymmetrischen Gesamtwellenfunktionen (Pauli-Prinzip)

$$|\psi_+\rangle_0 = |q\rangle_+ \cdot |0, 0\rangle \quad \text{und} \quad (2.4a)$$

$$|\psi_-\rangle_{m_s} = |q\rangle_- \cdot |1, m_s\rangle \quad (2.4b)$$

konstruieren lassen. Mit dem Heitler-London-Verfahren lässt sich zeigen, dass $E_+ \neq E_-$ ist.[NoIM1] Damit ist eine Ortswellenfunktion und somit auch die damit verbundene Spinfunktion bevorzugt. Es lässt sich also ein effektiver Hamilton-Operator

$$H_s |0, 0\rangle = E_+ |0, 0\rangle, \quad (2.5a)$$

$$H_s |1, m_s\rangle = E_- |1, m_s\rangle \quad (2.5b)$$

aufstellen, welcher durch

$$\begin{aligned} H_s &= \frac{1}{4}(E_+ + 3E_-) - (E_+ - E_-) \frac{1}{\hbar^2} \vec{S}_1 \vec{S}_2 \\ &=: J_0 - J_{1,2} \vec{S}_1 \vec{S}_2 \end{aligned} \quad (2.6)$$

gegeben ist. Wir postulieren, dass sich dieses Ergebnis auf ein System von N Teilchen mit

$$H_s = - \sum_{i,j} J_{i,j} \vec{S}_i \vec{S}_j \quad (2.7)$$

verallgemeinern lässt. Dies nennt man auch das Heisenberg-Modell. Anschaulich gibt der gefundene Hamilton-Operator die Wechselwirkungen zwischen den Spins der einzelnen Teilchen mit dem Kopplungstensor $J_{i,j}$ wieder.

Das Ising-Modell ist eine Vereinfachung, in der nur die z -Komponente der Spins einen Beitrag liefert, die Spins also den Wert $\sigma = \pm 1$ haben können. Zusätzlich verlangen wir, dass nur nächste Nachbarn miteinander wechselwirken mit $J_{i,j} = J$ für alle i, j . Außerdem soll jeder Ising-Spin jeweils vier nächste Nachbarn besitzen, weswegen man sich die Spins auf einem quadratischen Gittern verteilt vorstellen kann (siehe Abb. 2.1). Die Hamilton-Funktion lautet

$$H = -J \sum_{i,j} \sigma_i \sigma_j = -J \sum_{x,y} (\sigma_{x,y} \sigma_{x+1,y} + \sigma_{x,y} \sigma_{x,y+1}), \quad (2.8)$$

wobei die Summen über alle Nächst Nachbar-Wechselwirkungen der N Ising-Spins gehen mit $x = -L_x, \dots, L_x$ und $y = -L_y, \dots, L_y$.

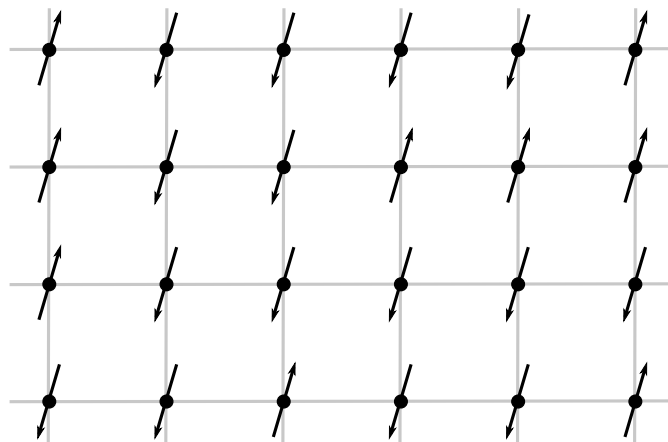


Abbildung 2.1.: Spin-Gitter des zweidimensionalen Ising-Modells.

Zusätzlich fordern wir periodische Randbedingungen

$$\sigma_{L_x+1} = \sigma_{-L_x} \quad \text{und} \quad \sigma_{L_y+1} = \sigma_{-L_y} . \quad (2.9)$$

Dies entspricht der Topologie eines Torus' (siehe Abb.2.2). Der Grund, warum wir dies tun ist, dass ein endliches System ohne Randbedingungen keinen Phasenübergang aufweist [NolM2] (Tatsächlich ist es so, dass alle endliche Systeme keinen Phasenübergang besitzen.[Nol6]).

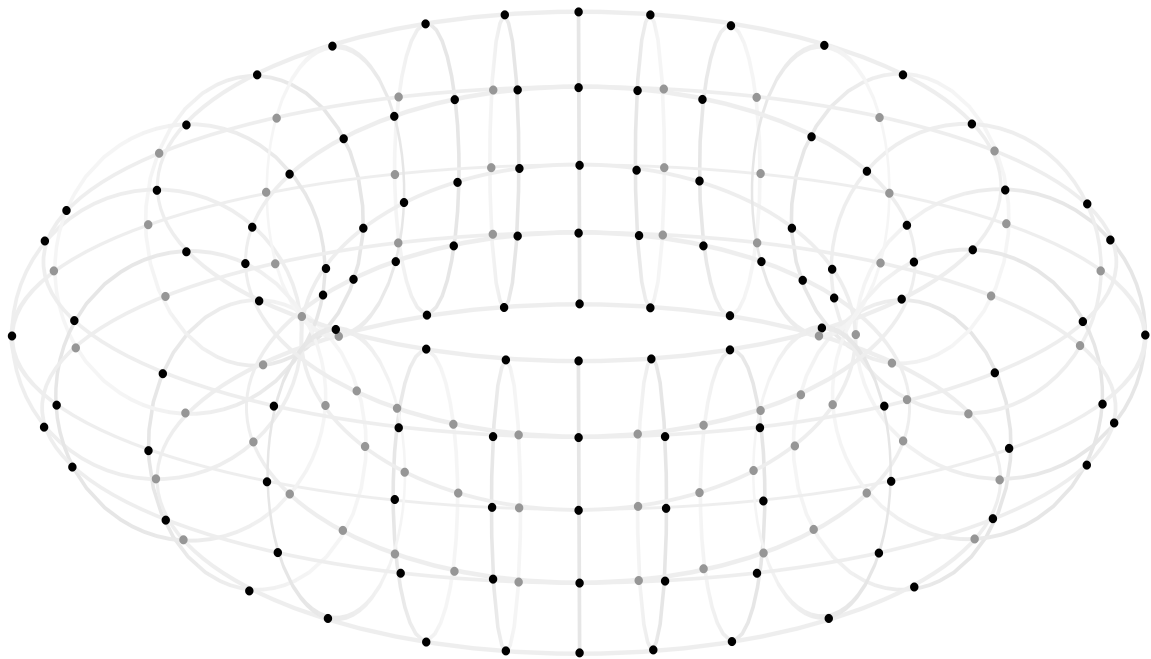


Abbildung 2.2.: Periodische Randbedingungen eines Torus'. Die Ising-Spins sind als schwarze Punkte auf dem zweidimensionalen Gitter, das auf die Fläche des Torus abgebildet wird, eingezeichnet. Die Verbindungslinien deuten die Kopplung J an.

2.2. Grundlagen der statistischen Physik

Zielsetzung bei der Lösung des zweidimensionalen Ising-Modells ist die Berechnung der kanonischen Zustandssumme $Z(\beta)$ und daraus der freien Energie $F(\beta)$. $\beta = 1/k_B T$ ist die inverse Temperatur des Systems, mit der Boltzmann-Konstanten k_B . Aus der Unstetigkeit der zweiten Ableitung von F folgt ein Phasenübergang an dieser Stelle β_c (Curie-Temperatur). Dieses Unterkapitel dient dem Zweck, die relevanten Größen und Beziehungen aufzuzeigen. Als Referenz dienen beispielsweise [Nol4], [Nol6].

Die unabhängigen Zustandsvariablen des Systems sind die durch ein externes Wärmebad vorgegebene Temperatur T , das Volumen V und die Teilchenzahl N . Dementsprechend wird im kanonischen Ensemble gerechnet. Die kanonische Zustandssumme wird aus der Normierung der Phasenraumdichte definiert als

$$Z = \text{Sp}(e^{-\beta H}). \quad (2.10)$$

Sie beinhalten die volle Information über das System. In unserem Fall bedeutet die Spur, dass wir über alle möglichen Kombinationen von Spins summieren. Einsetzen von (2.8) liefert somit

$$Z = \sum_{\sigma_1}^{\pm 1} \sum_{\sigma_2}^{\pm 1} \cdots \sum_{\sigma_N}^{\pm 1} \exp\left(\beta J \sum_{i,j} \sigma_i \sigma_j\right) = \sum_{\{\sigma\}} \exp\left(\beta J \sum_{i,j} \sigma_i \sigma_j\right). \quad (2.11)$$

Wir werden oft die Abkürzung

$$K = \beta J \quad (2.12)$$

benutzen.

Der Zusammenhang zwischen statistischer Physik und Thermodynamik ist durch die freie Energie pro Spin

$$F = U - TS = - \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{N} k_B T \ln(Z) \quad (2.13)$$

gegeben. Das Potential F wird im thermodynamischen Gleichgewicht minimal. F ist eine konkave Funktion von T .

Als einen Phasenübergang definieren wir eine Unstetigkeit einer sonst analytischen Funktion, beispielsweise der spezifischen Wärme $C = \frac{\partial U}{\partial T} = \frac{\partial}{\partial T} k_B T^2 \frac{\partial}{\partial T} \ln(Z)$. Ein Phasenübergang findet sich also, wenn die zweite Ableitung von F unstetig ist.

Die spontane Magnetisierung

$$M_S(T) = \lim_{B_0 \rightarrow 0} M(T, B_0)$$

kann als Ordnungsparameter des Modells dienen. Da wir die Zustandssumme jedoch nur ohne äußeres Magnetfeld berechnen können, ist eine Definition durch den Mittelwert der Ising-Spins via

$$M_S^2(T) = \mu_B^2 \langle \sigma \rangle^2 = \mu_B^2 \lim_{|i-j| \rightarrow \infty} \langle \sigma_i \sigma_j \rangle, \quad (2.14)$$

da die Magnetisierung eines Stoffes mit der Ausrichtung der inneren, mikroskopischen magnetischen Momente zusammenhängt, sinnvoller.

Die Korrelationslänge ξ ist ein Maß der Reichweite der Spinkorrelation $\langle \sigma_i \sigma_j \rangle$. Sie divergiert im kritischen Bereich,

$$\xi(T) \xrightarrow{T \rightarrow T_c} \infty. \quad (2.15)$$

3. Analytische Lösung durch Graßmann-Variablen

Die erste analytische Lösung des zweidimensionalen Ising-Modells wurde 1944 von Onsager [Ons] geliefert. Er benutzte dafür die Transfermatrix-Methode. In diesem Kapitel wird jedoch ein anderer Lösungsweg behandelt, welcher 1980 von S. Samuel [Sam1] vorgeschlagen wurde. Hierbei wird die Zustandssumme des Ising-Modells als Pfadintegral und dessen Wirkung in Form von Graßmann-Variablen ausgedrückt.

3.1. Hochtemperatur-Entwicklung

Schreiben wir zunächst erneut die Zustandssumme

$$Z = \sum_{\{\sigma\}} \prod_{i,j} \exp(K\sigma_i\sigma_j) \quad (3.1)$$

auf, so kann man die Exponentialfunktion in ihren geraden cosh- und ungeraden sinh-Anteil zerlegen. Daraus folgt unmittelbar, dass sich Z zu

$$Z = \sum_{\{\sigma\}} \prod_{i,j} [\cosh(K) + \sigma_i\sigma_j \sinh(K)] \quad (3.2)$$

vereinfacht. Das Produkt geht über alle Kombinationen von Wechselwirkungen, weswegen aufgrund der periodischen Randbedingungen $2N$ mal mit dem von $\sigma_i\sigma_j$ unabhängigen $\cosh(\beta J)$ multipliziert wird, also

$$Z = \cosh^{2N}(K) \sum_{\{\sigma\}} \prod_{i,j} [1 + \sigma_i\sigma_j \tanh(K)] . \quad (3.3)$$

Für $T \rightarrow \infty$ geht $\tanh(K) \rightarrow 0$. Wir wollen das Produkt in Z nach Potenzen von

$$t = \tanh(K) \quad (3.4)$$

entwickeln:

$$Z = \cosh^{2N}(K) \sum_{\{\sigma\}} \left[1 + t \sum_{\nu=1}^{2N} \sigma_{i_\nu} \sigma_{j_\nu} + t^2 \sum_{\substack{\nu,\mu=1 \\ \nu \neq \mu}}^{2N} (\sigma_{i_\nu} \sigma_{j_\mu}) (\sigma_{i_\mu} \sigma_{j_\nu}) + \dots \right]. \quad (3.5)$$

Wenn mindestens einer der σ_i in einer ungeraden Anzahl vorkommt, verschwindet der gesamte Term, da $\sum_{\sigma_i} \sigma_i^n = 0$ für n ungerade. Dies bedeutet im Umkehrschluss, dass alle Spins in gerader Anzahl vorkommen müssen, weswegen jede Ordnung einen Faktor 2^N gibt. Dadurch vereinfacht sich die Zustandssumme zu

$$Z = 2^N \cosh^{2N}(K) \sum_{k=0}^{\infty} c_k t^k. \quad (3.6)$$

Es ist zielführend, das Modell graphisch darzustellen. Jeweils zwei Gitterpunkte (sog. Vertices) σ_i und σ_j werden in (3.5) einem Faktor t zugeordnet. t steht damit für die Stärke der neuen Wechselwirkung der beiden Spins und kann durch eine Linie zwischen diesen beiden Vertices verdeutlicht werden.

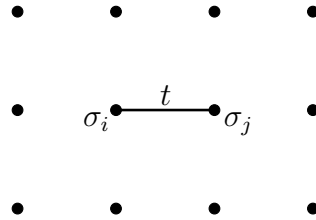


Abbildung 3.1.: Veranschaulichung der Spin-Paare der Hochtemperaturentwicklung.

Daraus, dass alle Spins geradzahlig vorkommen müssen, folgt, dass eine gerade Anzahl an Linien (zwei oder vier) von jedem Vertex ausgeht. Es lassen sich daher nur geschlossene Polygone zeichnen. c_k ist dann die Anzahl der Möglichkeiten, ein Polygon aus k Linien zu zeichnen. Die Zustandssumme lässt sich daher auch effektiv

$$Z = 2^N \cosh^{2N}(K) \sum_{\text{Polygone}} t^{2(k_v+k_h)} \quad (3.7)$$

schreiben. Es wird über alle geschlossenen Polygone summiert (die nicht unbedingt miteinander verbunden sein müssen), $2k_v/2k_h$ zählt die vertikalen/horizontalen Linien.

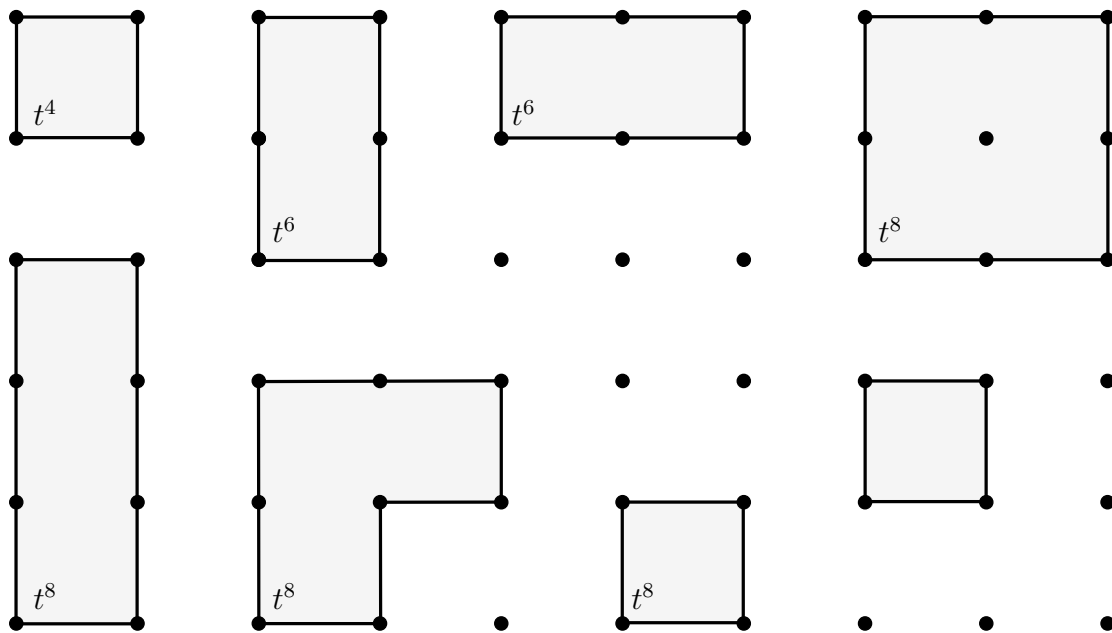


Abbildung 3.2.: Möglichkeiten, geschlossene Polygone zu zeichnen. Für t^4 , d.h. 4 Linien, existiert nur ein zeichnbares Polygon. N Gitterpunkte ergeben N mögliche Polygone (periodische Randbedingung), also $c_4 = N$. Für t^6 lässt sich ein Rechteck zeichnen. Es lässt sich verkippen, also $c_6 = 2N$. Für t^8 gibt es $c_8 = N + 2N + 4N + \frac{1}{2}N(N-5)$ Möglichkeiten ($N-5$, da das zweite Rechteck nicht an den 4 Seiten des Rechtecks und nicht im ersten Rechteck selbst sein kann; $1/2$, da sie ununterscheidbar sind).

Es liegt nahe, die Polygone als Weiss-Bezirke und die von uns gezeichneten Linien als Bloch-Wände aufzufassen. Als Weiss-Bezirke bezeichnet man Domänen gleichgerichteten Spins, aus denen ein Ferromagnet aufgebaut ist. [Dem] Sie werden z.B. durch Bloch-Wände getrennt, deren Magnetisierung parallel zur Wandebene gerichtet ist. [Blu]

Gegen diese Betrachtung spricht, dass nicht alle Spins innerhalb der gezeichneten Polygone $+1$ und außerhalb -1 (oder andersherum) sein können, da sonst nicht alle möglichen Kombinationen zeichnbar sind (siehe dazu z.B. die Polygone in Abb. 3.2).

Für uns ist von Interesse, wie wir die Summe über alle geschlossenen Polygone auswerten. Dabei besitzen die sog. Graßmann-Variablen, die wir im Folgenden einführen wollen, nützliche Eigenschaften zur Lösung der Zustandssumme.

3.2. Graßmann-Variablen

Unter Graßmann-Variablen η_i versteht man eine Basis aus n Variablen, die

$$\{\eta_i, \eta_j\} := \eta_i \eta_j + \eta_j \eta_i = 0 \quad \forall i, j = 1, \dots, n \quad (3.8)$$

erfüllen, also ihr Vorzeichen unter Vertauschung ändern (antikommutieren). [Weg][Sre]
Speziell für $i = j$ folgt direkt

$$\eta_i^2 = 0 \quad \forall i. \quad (3.9)$$

Diese Eigenschaft ist sehr nützlich. Betrachten wir zum Beispiel die Funktion e^{η_i} , so folgt direkt mit (3.9), dass

$$\begin{aligned} e^{\eta_i} &= 1 + \eta_i + \frac{1}{2!} \eta_i^2 + \frac{1}{3!} \eta_i^3 + \dots \\ &= 1 + \eta_i. \end{aligned} \quad (3.10)$$

Allgemein lässt sich eine beliebige Funktion $f(\eta_1, \dots, \eta_n)$ als

$$\begin{aligned} f(\eta_1, \dots, \eta_n) &= a_0 + \sum_i \eta_i a_i + \frac{1}{2!} \sum_{i,j} \eta_i \eta_j a_{i,j} + \dots + \frac{1}{n!} \sum_{i_1, i_2, \dots, i_n} \eta_{i_1} \dots \eta_{i_n} a_{i_1, \dots, i_n} \\ &= a_0 + \sum_i \eta_i a_i + \sum_{i < j} \eta_i \eta_j a_{i,j} + \dots + \eta_1 \dots \eta_n a_{1, \dots, n} \end{aligned} \quad (3.11)$$

schreiben, da die Taylor-Reihe bei der Ordnung n abbricht [Sre]. Die total antisymmetrischen Koeffizienten a wurden hier präventiv nach hinten gesetzt. Wollten wir die Funktion selbst kommutativ halten, müssten die Koeffizienten teilweise auch als antikommutierende Zahlen gesehen werden, weswegen die Anordnung wichtig wäre.

Als nächstes gilt es, eine geeignete Ableitung bezüglich der η_i zu finden. Zunächst ist es sinnvoll,

$$\frac{\partial \eta_j}{\partial \eta_i} = \delta_{i,j} \quad (3.12)$$

zu setzen. Fügt man nun eine weitere Variable hinzu, gilt

$$\frac{\partial}{\partial \eta_i} \eta_j \eta_i = \frac{\partial}{\partial \eta_i} (-\eta_i \eta_j) = -\eta_j. \quad (3.13)$$

Dies nennt man auch die linksseitige Ableitung. Die sog. rechtsseitige Ableitung wird analog von rechts angewendet, wodurch das Vorzeichen wechselt. Wir beschränken uns

auf die linksseitige Ableitung. Angewendet auf die Funktion in (3.11) ist

$$\frac{\partial}{\partial \eta_k} f(\eta_1, \dots, \eta_n) = a_k + \sum_i \eta_i a_{k,i} + \dots + \frac{1}{n!} \sum_{i_2, \dots, i_n} \eta_{i_2} \dots \eta_{i_n} a_{k, i_2, \dots, i_n}, \quad (3.14)$$

sowie

$$\frac{\partial}{\partial \eta_n} \dots \frac{\partial}{\partial \eta_1} f(\eta_1, \dots, \eta_n) = a_{1, \dots, n}. \quad (3.15)$$

Für das Integral über Graßmann-Variablen verlangen wir Eigenschaften analog zur (konvergierenden) Integration nach einer „normalen“ Variablen von $-\infty$ nach $+\infty$. Dies sind Linearität

$$\int d\eta_i c f(\eta_i) = c \int d\eta_i f(\eta_i) \quad (3.16)$$

($c \in \mathbb{C}$) und Translationsinvarianz

$$\int d\eta_i f(\eta_i) = \int d\eta_i f(\eta_i + a). \quad (3.17)$$

Für $f(\eta_i) = \eta_i$ gilt demnach

$$\int d\eta_i \eta_i = \int d\eta_i (\eta_i + a) \Rightarrow \int d\eta_i a = 0. \quad (3.18)$$

Für die Integration von η_i steht uns die Normierung frei und wir wählen

$$\int d\eta_i \eta_i = 1. \quad (3.19)$$

Verallgemeinert gilt also für Funktionen f nach (3.11) unter Berücksichtigung der Reihenfolge der Differentiale

$$\int d^n \eta f(\eta_1, \dots, \eta_n) := \int d\eta_n \dots d\eta_1 f(\eta_1, \dots, \eta_n) = a_{1, \dots, n}. \quad (3.20)$$

Ableitung und Integral stimmen für alle f überein.

Die Determinante und die sog. Pfaffsche Form (bzw. Pfaffsche Determinante) einer Matrix kann durch ein Integral über Graßmann-Variablen dargestellt werden. Dazu betrachten wir [Weg] folgend das Integral

$$I_n = \int d\eta_n d\eta'_n \dots d\eta_1 d\eta'_1 \exp \left(\sum_{i,j} \eta'_i m_{i,j} \eta_j \right) =: \int d^n \eta d^n \eta' \exp(-\eta^T M \eta') \quad (3.21)$$

mit $\eta^T = (\eta_1, \dots, \eta_n)$ und der Matrix $M = (m_{i,j})$. Für $n = 1$ ist

$$I_1 = \int d\eta_1 d\eta'_1 \exp(\eta'_1 m_{1,1} \eta_1) = \int d\eta_1 d\eta'_1 (\eta'_1 m_{1,1} \eta_1 + 1) = m_{1,1}. \quad (3.22)$$

Für $n > 1$ versuchen wir zunächst, (3.21) nach η'_1 zu integrieren.

$$\begin{aligned} I_n &= \int d\eta_n d\eta'_n \cdots d\eta_1 d\eta'_1 \exp\left(\sum_{i=1,j=1}^n \eta'_i m_{i,j} \eta_j\right) \\ &= \int d\eta_n d\eta'_n \cdots d\eta_1 d\eta'_1 \exp\left(\sum_{k=1}^n \eta'_1 m_{1,k} \eta_k\right) \exp\left(\sum_{i=2,j=1}^n \eta'_i m_{i,j} \eta_j\right) \\ &= \int d\eta_n d\eta'_n \cdots d\eta_1 d\eta'_1 \prod_{k=1}^n (\eta'_1 m_{1,k} \eta_k + 1) \exp\left(\sum_{i=2,j=1}^n \eta'_i m_{i,j} \eta_j\right) \\ &\stackrel{(3.9)}{=} \int d\eta_n d\eta'_n \cdots d\eta_1 d\eta'_1 \sum_{k=1}^n (\eta'_1 m_{1,k} \eta_k) \exp\left(\sum_{i=2,j=1}^n \eta'_i m_{i,j} \eta_j\right) \\ &= \sum_{k=1}^n \int d\eta_n d\eta'_n \cdots d\eta_1 m_{1,k} \eta_k \exp\left(\sum_{i=2,j=1}^n \eta'_i m_{i,j} \eta_j\right). \end{aligned}$$

Nun wird die Integration über η_k ausgeführt, sodass

$$\begin{aligned} I_n &= \sum_{k=1}^n \int d\eta_n d\eta'_n \cdots d\eta'_{k+1} d\eta'_k \cdots d\eta_1 (-1)^{k-1} d\eta_k m_{1,k} \eta_k \exp\left(\sum_{i=2,j=1}^n \eta'_i m_{i,j} \eta_j\right) \\ &= \sum_{k=1}^n (-1)^{k-1} m_{1,k} \int d\eta_n d\eta'_n \cdots d\eta'_{k+1} d\eta'_k \cdots d\eta_1 \exp\left(\sum_{i \neq 1, j \neq k}^n \eta'_i m_{i,j} \eta_j\right). \quad (3.23) \end{aligned}$$

Damit besitzt das Integral die Form des Laplaceschen Entwicklungssatzes einer Determinanten. Das neue Integral besitzt die ursprüngliche Form, in der jedoch die k -te Zeile und 1-te Spalte gestrichen wurde. (3.22) liefert als Determinante einer 1×1 Matrix den Induktions-Anfang. Zusammenfassend gilt also

$$\det(M) = \int d^n \eta d^n \eta' \exp(\eta'^T M \eta). \quad (3.24)$$

Zusätzlich definieren wir die sog. Pfaffsche Form einer antisymmetrischen Matrix über

$$\text{pf}(M) := \int d^n \eta \exp\left(\frac{1}{2} \eta^T M \eta\right). \quad (3.25)$$

Das Quadrat

$$\begin{aligned} (\text{pf}(M))^2 &= \int d^n \eta \exp\left(\frac{1}{2} \eta^T M \eta\right) \int d^n \eta' \exp\left(\frac{1}{2} \eta'^T M \eta'\right) \\ &= \int d\eta_n \cdots d\eta_1 d\eta'_n \cdots d\eta'_1 \exp\left(\frac{1}{2} \sum_{i,j} (\eta_i m_{i,j} \eta_j + \eta'_i m_{i,j} \eta'_j)\right) \end{aligned}$$

kann durch Variablensubstitution

$$\begin{aligned} \zeta_i &= \frac{1}{\sqrt{2}}(\eta_i + i\eta'_i), & \zeta'_i &= \frac{1}{\sqrt{2}}(\eta_i - i\eta'_i), \\ d\zeta_i d\zeta'_i &= i d\eta_i d\eta'_i, & \eta_i \eta_j + \eta'_i \eta'_j &= \zeta_i \zeta'_j + \zeta_i \zeta'_j \end{aligned} \quad (3.26)$$

in die Form

$$\begin{aligned} (\text{pf}M)^2 &= \int d\eta_n \cdots d\eta_1 d\eta'_n \cdots d\eta'_1 \exp\left(\frac{1}{2} \sum_{i,j} (\eta_i m_{i,j} \eta_j + \eta'_i m_{i,j} \eta'_j)\right) \\ &= \int d\eta_n d\eta'_n \cdots d\eta_1 d\eta'_1 (-1)^{\frac{n(n-1)}{2}} \exp\left(\frac{1}{2} \sum_{i,j} (\eta_i m_{i,j} \eta_j + \eta'_i m_{i,j} \eta'_j)\right) \\ &\stackrel{(3.26)}{=} \int d\zeta_n d\zeta'_n \cdots d\zeta_1 d\zeta'_1 (-i)^n (-1)^{\frac{n(n-1)}{2}} \exp\left(\frac{1}{2} \sum_{i,j} (\zeta_i m_{i,j} \zeta'_j + \zeta'_i m_{i,j} \zeta_j)\right) \\ &= \int d\zeta_n d\zeta'_n \cdots d\zeta_1 d\zeta'_1 \exp\left(\sum_{i,j} \zeta'_i m_{i,j} \zeta_j\right) \end{aligned} \quad (3.27)$$

überführt werden (Die Vorfaktoren $(-i)^n (-1)^{\frac{n(n-1)}{2}} = (-i)^{n^2}$ können weggelassen werden, da das Integral für ungerade n verschwindet.). Somit nimmt das Integral die Form einer Determinante an und wir schließen

$$\text{pf}(M) = \sqrt{\det M} = \int d^n \eta \exp\left(\frac{1}{2} \eta^T M \eta\right). \quad (3.28)$$

3.3. Darstellung des Ising-Modells durch Graßmann-Variablen

Wir wollen den Charakter der Integration über Graßmann-Variablen ausnutzen, um eine Zustandssumme zu erstellen, die nur geschlossene Polygone nach (3.7) enthält. Die folgenden Überlegungen orientieren sich dabei an [Weg]. Bei der Integration über Graßmann-Variablen überleben nur die Terme, die ein Produkt aller Variablen enthalten. Dies können wir ausnutzen, indem wir jedem Vertex des Ising-Gitters an den Punkten (x, y) vier Graßmann-Variablen $\eta_{x,y}$ zuweisen, d.h. für jede Richtung eine (siehe Abb. 3.3), und so schließlich nur die Terme des Integrals einen Wert beitragen, in dem alle Variablen vorkommen.

$$\begin{array}{ccc} \eta_{x,y}^{\uparrow} & & \\ \eta_{x,y}^{\leftarrow} (x, y) \eta_{x,y}^{\rightarrow} & \Leftrightarrow & \begin{array}{c} \times \\ \times \bullet \times \\ \times \end{array} \\ \eta_{x,y}^{\downarrow} & & \end{array}$$

Abbildung 3.3.: Graphische Repräsentation des Modells. Jeder Ising-Spin am Ort (x, y) wird durch einen Punkt dargestellt. Den Punkten werden vier Grassmann-Variablen $\eta_{x,y}$ zugeordnet, die im Folgenden als Kreuze vereinfacht dargestellt werden.

Zunächst führen wir für jedes $1 + t\sigma_i\sigma_j$ aus der Hochtemperaturentwicklung (3.5) einen Faktor

$$1 + t a_h \eta_{x,y}^{\rightarrow} \eta_{x+1,y}^{\leftarrow} = \exp \{ t a_h \eta_{x,y}^{\rightarrow} \eta_{x+1,y}^{\leftarrow} \}, \text{ bzw.} \quad (3.29a)$$

$$1 + t a_v \eta_{x,y}^{\uparrow} \eta_{x,y+1}^{\downarrow} = \exp \{ t a_v \eta_{x,y}^{\uparrow} \eta_{x,y+1}^{\downarrow} \} \quad (3.29b)$$

ein und definieren

$$S_{b(\text{bloch wall})} := t \sum_{x,y} (a_h \eta_{x,y}^{\rightarrow} \eta_{x+1,y}^{\leftarrow} + a_v \eta_{x,y}^{\uparrow} \eta_{x,y+1}^{\downarrow}). \quad (3.30)$$

Die Summe geht wie in (2.8) von $x = -L_x$ bis L_x bzw. $x = -L_y$ bis L_y , also über das gesamte Gitter mit $N = (2L_x + 1)(2L_y + 1)$ Ising-Spins. Die Terme beschreiben die Linien zwischen den einzelnen Vertizes, welche wir im Folgenden (wie zuvor diskutiert) als Bloch-Wände bezeichnen. Die Vorfaktoren $a = \pm 1$ müssen so gewählt werden, dass jeder Beitrag positiv in die Zustandssumme eingeht.

Bisher tragen nur die Vertizes bei, an denen 4 Bloch-Wände anschließen, also sog. Knotenpunkte der Polygone. Um alle Teile der Polygone miteinzubeziehen, müssen wir jedem Vertex, an dem das Polygon eine Kurve einschlägt, oder an dem es geradeaus weiter geht, zusätzliche Graßmann-Variablen zuweisen. Wir führen daher für jedes (x, y) einen zusätzlichen Faktor

$$\begin{aligned} \frac{1}{2} \sum_{i,j} a_{i,j} \eta^{(i)} \eta^{(j)} &= a_{\uparrow \rightarrow} \eta^{\uparrow} \eta^{\rightarrow} + a_{\uparrow \leftarrow} \eta^{\uparrow} \eta^{\leftarrow} + a_{\downarrow \rightarrow} \eta^{\downarrow} \eta^{\rightarrow} + a_{\downarrow \leftarrow} \eta^{\downarrow} \eta^{\leftarrow} \\ &\quad + a_{\uparrow \downarrow} \eta^{\uparrow} \eta^{\downarrow} + a_{\rightarrow \leftarrow} \eta^{\rightarrow} \eta^{\leftarrow} \end{aligned} \quad (3.31)$$

ein, wobei $i = \leftarrow, \rightarrow, \downarrow, \uparrow$ und $A = (a_{i,j})$ antisymmetrisch gewählt ist. Die Summe über die ersten vier Terme

$$S_{c(\text{corner})} := \sum_{x,y} (a_{\uparrow \rightarrow} \eta_{x,y}^{\uparrow} \eta_{x,y}^{\rightarrow} + a_{\uparrow \leftarrow} \eta_{x,y}^{\uparrow} \eta_{x,y}^{\leftarrow} + a_{\downarrow \rightarrow} \eta_{x,y}^{\downarrow} \eta_{x,y}^{\rightarrow} + a_{\downarrow \leftarrow} \eta_{x,y}^{\downarrow} \eta_{x,y}^{\leftarrow}) \quad (3.32)$$

füllen die Ecken der Polygone.

$$S_{m(\text{monomer})} := \sum_{x,y} (a_{\uparrow \downarrow} \eta_{x,y}^{\uparrow} \eta_{x,y}^{\downarrow} + a_{\rightarrow \leftarrow} \eta_{x,y}^{\rightarrow} \eta_{x,y}^{\leftarrow}) \quad (3.33)$$

füllt die restlichen Stellen. Dies geschieht bei der Verknüpfung zweier horizontaler bzw. vertikaler Bloch-Wände, oder bei unbesetzten Vertizes, was wir nach [Sam1] Monomer bezeichnen. Abb. 3.4 zeigt die graphische Darstellung.

Die Zustandssumme nach (3.7) nimmt als Summe über alle möglichen Polygone die Form

$$Z = 2^N \cosh^{2N}(K) \int \mathcal{D}\eta \exp\{S_b(\eta) + S_c(\eta) + S_m(\eta)\} \quad (3.34)$$

mit

$$\mathcal{D}\eta := \prod_{x,y} d\eta_{x,y}^{\uparrow} d\eta_{x,y}^{\downarrow} d\eta_{x,y}^{\rightarrow} d\eta_{x,y}^{\leftarrow} \quad (3.35)$$

an. Dies entspricht augenscheinlich die Form eines Pfadintegrals (siehe dazu Anhang B.1).

Um alle Konstanten $a_{i,j}$ richtig zu wählen, werten wir das Integral

$$I(f) = \int d\eta^{\uparrow} d\eta^{\downarrow} d\eta^{\rightarrow} d\eta^{\leftarrow} f(\eta) \exp\left(\frac{1}{2} \sum_{i,j} a_{i,j} \eta^{(i)} \eta^{(j)}\right) \quad (3.36)$$

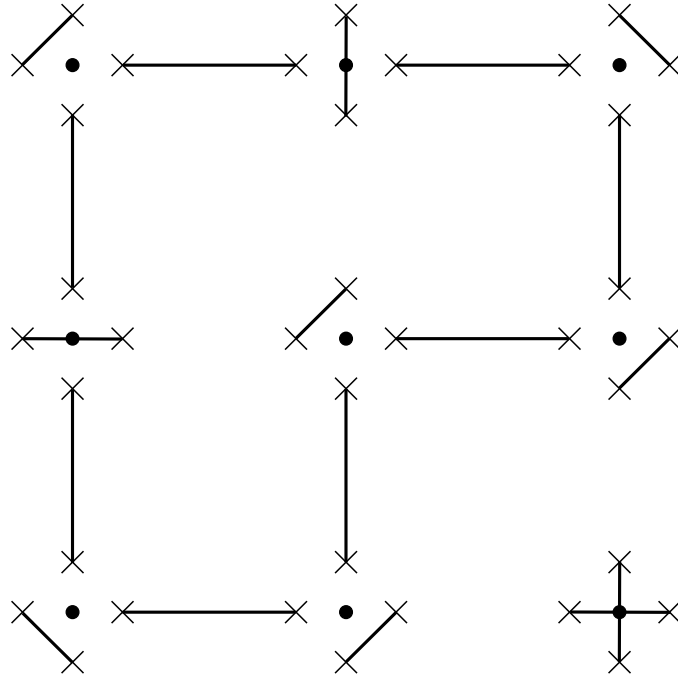


Abbildung 3.4.: Darstellung der mit t gewichteten Bloch-Wände $t\eta_{x,y}\eta_{x+1,y} + t\eta_{x,y}\eta_{x,y+1}$ sowie die durch (3.32) (Ecken) und (3.33) (Monomere) gegebenen Verbindungsstücke.

für die relevanten Kombinationen der η aus:

$$\begin{aligned}
I(1) &= \int d\eta^\uparrow d\eta^\downarrow d\eta^\rightarrow d\eta^\leftarrow \exp\left(\frac{1}{2} \sum_{i,j} a_{i,j} \eta^{(i)} \eta^{(j)}\right) \\
&= \int d\eta^\uparrow d\eta^\downarrow d\eta^\rightarrow d\eta^\leftarrow \exp\left(a_{\uparrow\rightarrow} \eta^\uparrow \eta^\rightarrow + a_{\uparrow\leftarrow} \eta^\uparrow \eta^\leftarrow + a_{\downarrow\rightarrow} \eta^\downarrow \eta^\rightarrow \right. \\
&\quad \left. + a_{\downarrow\leftarrow} \eta^\downarrow \eta^\leftarrow + a_{\uparrow\downarrow} \eta^\uparrow \eta^\downarrow + a_{\rightarrow\leftarrow} \eta^\rightarrow \eta^\leftarrow\right) \\
&= \int d\eta^\uparrow d\eta^\downarrow d\eta^\rightarrow d\eta^\leftarrow (1 + a_{\uparrow\rightarrow} \eta^\uparrow \eta^\rightarrow)(1 + a_{\uparrow\leftarrow} \eta^\uparrow \eta^\leftarrow)(1 + a_{\downarrow\rightarrow} \eta^\downarrow \eta^\rightarrow) \\
&\quad \cdot (1 + a_{\downarrow\leftarrow} \eta^\downarrow \eta^\leftarrow)(1 + a_{\uparrow\downarrow} \eta^\uparrow \eta^\downarrow)(1 + a_{\rightarrow\leftarrow} \eta^\rightarrow \eta^\leftarrow) \\
&= \int d\eta^\uparrow d\eta^\downarrow d\eta^\rightarrow d\eta^\leftarrow (a_{\uparrow\downarrow} \eta^\uparrow \eta^\downarrow a_{\rightarrow\leftarrow} \eta^\rightarrow \eta^\leftarrow + a_{\uparrow\rightarrow} \eta^\uparrow \eta^\rightarrow a_{\downarrow\leftarrow} \eta^\downarrow \eta^\leftarrow \\
&\quad + a_{\uparrow\leftarrow} \eta^\uparrow \eta^\leftarrow a_{\downarrow\rightarrow} \eta^\downarrow \eta^\rightarrow) \\
&= \int d\eta^\uparrow d\eta^\downarrow d\eta^\rightarrow d\eta^\leftarrow (a_{\uparrow\downarrow} a_{\rightarrow\leftarrow} \eta^\leftarrow \eta^\rightarrow \eta^\downarrow \eta^\uparrow + a_{\uparrow\rightarrow} a_{\downarrow\leftarrow} \eta^\leftarrow \eta^\rightarrow \eta^\downarrow \eta^\uparrow \\
&\quad + a_{\uparrow\leftarrow} a_{\downarrow\rightarrow} \eta^\leftarrow \eta^\rightarrow \eta^\downarrow \eta^\uparrow) \\
&= a_{\uparrow\downarrow} a_{\rightarrow\leftarrow} - a_{\uparrow\rightarrow} a_{\downarrow\leftarrow} + a_{\uparrow\leftarrow} a_{\downarrow\rightarrow}.
\end{aligned}$$

Dies folgt auch direkt aus der Beziehung (3.28):

$$\begin{aligned}
I(1) &= \int d\eta^\uparrow d\eta^\downarrow d\eta^\rightarrow d\eta^\leftarrow \exp\left(\frac{1}{2} \sum_{i,j} a_{i,j} \eta^{(i)} \eta^{(j)}\right) \\
&= \sqrt{\det A} \\
&= a_{\uparrow\downarrow} a_{\rightarrow\leftarrow} - a_{\uparrow\rightarrow} a_{\downarrow\leftarrow} + a_{\uparrow\leftarrow} a_{\downarrow\rightarrow}.
\end{aligned} \tag{3.37a}$$

Weiterhin gilt

$$\begin{aligned}
I(\eta^\uparrow \eta^\downarrow) &= \int d\eta^\uparrow d\eta^\downarrow d\eta^\rightarrow d\eta^\leftarrow \eta^\uparrow \eta^\downarrow \exp\left(\frac{1}{2} \sum_{i,j} a_{i,j} \eta^{(i)} \eta^{(j)}\right) \\
&= \int d\eta^\uparrow d\eta^\downarrow d\eta^\rightarrow d\eta^\leftarrow \frac{\partial}{\partial a_{\uparrow\downarrow}} \exp\left(\frac{1}{2} \sum_{i,j} a_{i,j} \eta^{(i)} \eta^{(j)}\right) \\
&= \frac{\partial}{\partial a_{\uparrow\downarrow}} (a_{\uparrow\downarrow} a_{\rightarrow\leftarrow} - a_{\uparrow\rightarrow} a_{\downarrow\leftarrow} + a_{\uparrow\leftarrow} a_{\downarrow\rightarrow}) \\
&= a_{\rightarrow\leftarrow}
\end{aligned} \tag{3.37b}$$

und in analoger Rechnung

$$I(\eta^\uparrow \eta^\rightarrow) = -a_{\downarrow\leftarrow}, \tag{3.37c}$$

$$I(\eta^\uparrow \eta^\leftarrow) = a_{\downarrow\rightarrow}, \tag{3.37d}$$

$$I(\eta^\downarrow \eta^\rightarrow) = a_{\uparrow\leftarrow}, \tag{3.37e}$$

$$I(\eta^\downarrow \eta^\leftarrow) = -a_{\uparrow\rightarrow}, \tag{3.37f}$$

$$I(\eta^\rightarrow \eta^\leftarrow) = a_{\uparrow\downarrow} \text{ und} \tag{3.37g}$$

$$I(\eta^\uparrow \eta^\downarrow \eta^\rightarrow \eta^\leftarrow) = 1. \tag{3.37h}$$

Das Integral $I(1)$ aus (3.37a) gibt den Fall an, dass an einem Vertex keine Linie ankommt. Zu keinem Polygon gehörend sollen sie also auch nicht zur Zustandssumme beitragen, weswegen wir

$$a_{\uparrow\downarrow} a_{\rightarrow\leftarrow} - a_{\uparrow\rightarrow} a_{\downarrow\leftarrow} + a_{\uparrow\leftarrow} a_{\downarrow\rightarrow} = 1 \tag{3.38}$$

verlangen. Zur weiteren Bestimmung der Koeffizienten zerlegen wir die Polygone in geschlossene Schleifen, die wir im Uhrzeigersinn durchlaufen. Dies führt zu einem Produkt von Bloch-Wänden. Danach setzen wir die letzte Graßmann-Variable bis ganz nach vorne, um die Variablen des entsprechenden Ortes zusammenzuführen, wodurch

wir einen Faktor -1 hinzubekommen:

$$\begin{aligned} & (ta_{i_1} \eta_{x_1, y_1}^{(i_1)} \eta_{x_2, y_2}^{(i_2)}) \cdot (ta_{i_2} \eta_{x_2, y_2}^{(i_2)} \eta_{x_3, y_3}^{(i_3)}) \cdots (ta_{i_n} \eta_{x_n, y_n}^{(i_n)} \eta_{x_1, y_1}^{(i_1)}) = \\ & = -(ta_{i_1} \eta_{x_1, y_1}^{(i_1)} \eta_{x_1, y_1}^{(i_1)}) \cdot (ta_{i_2} \eta_{x_2, y_2}^{(i_2)} \eta_{x_2, y_2}^{(i_2)}) \cdots (ta_{i_n} \eta_{x_n, y_n}^{(i_n)} \eta_{x_n, y_n}^{(i_n)}). \end{aligned} \quad (3.39)$$

Insgesamt ist somit ein Faktor $(-1)^l$ zu berücksichtigen, wobei l die Anzahl an Schleifen ist. Durch das Umsortieren liegen nun immer zwei Variablen desselben Vertex' (x_i, y_i) beieinander. Wir interpretieren diese neuen Paare als Kurven (siehe Abb. 3.5).

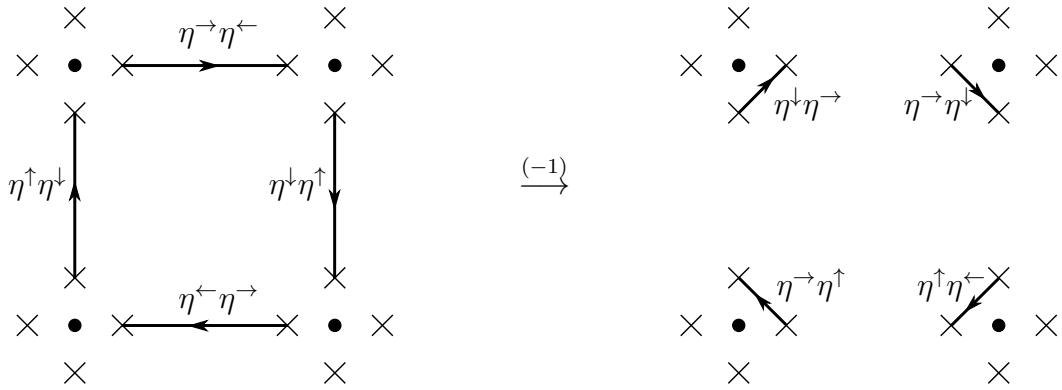


Abbildung 3.5.: Beispiel einer Verschiebung der Graßmann-Variablen der Bloch-Wände zu Paaren des selben Vertex. Diese nehmen die Funktion von Links-/Rechtskurven beim Entlanggehen einer geschlossenen Schleife ein. Die Reihenfolge der Variablen deutet die Richtung (Pfeil) an, in der man sich durch die Schleife bewegt.

Wir bezeichnen mit $n_{i,j}$ die Anzahl an Operatoren $\eta^{(i)}\eta^{(j)}$. $n_{i,j}$ gibt damit die Anzahl an Kurven einer bestimmten Sorte an, die beim Durchgehen der Schleife gemacht werden (Die Pfeile sind hierbei nicht mit der Richtung der Kurve zu verwechseln: $\uparrow\rightarrow$, $\downarrow\leftarrow$, $\rightarrow\downarrow$ und $\leftarrow\uparrow$ stehen für Linkskurven, $\leftarrow\downarrow$, $\rightarrow\uparrow$, $\uparrow\leftarrow$ und $\downarrow\rightarrow$ für Rechtskurven und $\uparrow\downarrow$, $\downarrow\uparrow$, $\rightarrow\leftarrow$ und $\leftarrow\rightarrow$ für geradeaus.).

Betrachten wir als einfachen Fall eine quadratische Schleife aus vier Vertices, so werden genau vier Rechtsabbiegungen vollzogen. Fügt man weitere Kurven an, bekommt man für jede Linkskurve, die hinzukommt, automatisch eine entsprechend gegengesetzte Rechtskurve, also bei l Schleifen

$$n_{\uparrow\rightarrow} = l + n_{\leftarrow\downarrow}, \quad (3.40a)$$

$$n_{\downarrow\leftarrow} = l + n_{\rightarrow\uparrow}, \quad (3.40b)$$

$$n_{\rightarrow\downarrow} = l + n_{\uparrow\leftarrow}, \text{ bzw.} \quad (3.40c)$$

$$n_{\leftarrow\uparrow} = l + n_{\downarrow\rightarrow} \quad (3.40d)$$

Kurven. (Streng genommen gilt dies nicht für Schleifen, die komplett um den Torus laufen, da dort jeder Rechts- eine Linkskurve zugeordnet ist. Dies gibt nach (3.39) pro Schleife einen Faktor -1 , was antiperiodischen Randbedingungen entspricht. Die modifizierte Zustandssumme ist im thermodynamischen Limes jedoch gleich.[Weg]) Für die Bestimmung von a_h und a_v ist die Anzahl k der Wände in eine Richtung relevant. Im einfachen Fall des Quadrats haben wir $k - 1$ Schritte geradeaus und eine Rechtskurve. Werden wie oben weitere „Defekte“ hinzugefügt, ersetzt eine Linkskurve bzw. die komplementäre Rechtskurve die vorherige Gerade. Dies leitet zu

$$k_{\text{up}} - n_{\downarrow\uparrow} = n_{\downarrow\rightarrow} + n_{\downarrow\leftarrow} = n_{\rightarrow\uparrow} + n_{\leftarrow\uparrow}, \quad (3.41a)$$

$$k_{\text{down}} - n_{\uparrow\downarrow} = n_{\uparrow\rightarrow} + n_{\uparrow\leftarrow} = n_{\rightarrow\downarrow} + n_{\leftarrow\downarrow}, \quad (3.41b)$$

$$k_{\text{right}} - n_{\leftarrow\rightarrow} = n_{\leftarrow\uparrow} + n_{\leftarrow\downarrow} = n_{\uparrow\rightarrow} + n_{\downarrow\rightarrow} \text{ und} \quad (3.41c)$$

$$k_{\text{left}} - n_{\rightarrow\leftarrow} = n_{\rightarrow\uparrow} + n_{\rightarrow\downarrow} = n_{\uparrow\leftarrow} + n_{\downarrow\leftarrow}. \quad (3.41d)$$

Falls vier Linien an einem Gitterpunkt enden, entsteht ein Knotenpunkt. Um hier geschlossene Polygone darzustellen, ist es sowohl möglich, die untere Variable mit der linken und die obere mit der rechten, als auch die untere Variable mit der rechten und die obere mit der linken zu verbinden. Dafür sollte

$$I(\eta^\downarrow\eta^{\leftarrow}) I(\eta^\uparrow\eta^{\rightarrow}) = I(\eta^\downarrow\eta^{\leftarrow}\eta^\uparrow\eta^{\rightarrow}) \stackrel{(3.37)}{\Rightarrow} a_{\uparrow\rightarrow} a_{\downarrow\leftarrow} = -1 \text{ und} \quad (3.42a)$$

$$I(\eta^\downarrow\eta^{\rightarrow}) I(\eta^\uparrow\eta^{\leftarrow}) = I(\eta^\downarrow\eta^{\rightarrow}\eta^\uparrow\eta^{\leftarrow}) \Rightarrow a_{\uparrow\leftarrow} a_{\downarrow\rightarrow} = 1 \quad (3.42b)$$

gelten.

Damit jeder Beitrag positiv eingeht, muss insgesamt für die Konstanten a

$$(-1)^l a_v^{k_{\text{up}}} (-a_v)^{k_{\text{down}}} a_h^{k_{\text{right}}} (-a_h)^{k_{\text{left}}} \prod_{i,j} I(\eta^{(i)} \eta^{(j)})^{n_{i,j}} \equiv 1 \quad (3.43)$$

gelten. Unter Ausnutzung der Gleichungen (3.37), sowie (3.40) und (3.41) folgt, dass

$$(a_v a_h a_{\downarrow\leftarrow} a_{\uparrow\rightarrow})^{n_{\leftarrow\downarrow} + n_{\rightarrow\uparrow} + l} (-a_v a_h a_{\downarrow\rightarrow} a_{\uparrow\leftarrow})^{n_{\uparrow\leftarrow} + n_{\downarrow\rightarrow} + l} (-a_v a_{\rightarrow\leftarrow})^{n_{\uparrow\downarrow} + n_{\downarrow\uparrow}} (-a_h a_{\uparrow\downarrow})^{n_{\rightarrow\leftarrow} + n_{\leftarrow\rightarrow}} = 1$$

ist (siehe Anhang B.2), welches für

$$a_v a_h a_{\downarrow\leftarrow} a_{\uparrow\rightarrow} = 1, \quad (3.44a)$$

$$a_v a_h a_{\downarrow\rightarrow} a_{\uparrow\leftarrow} = -1, \quad (3.44b)$$

$$a_v a_{\rightarrow\leftarrow} = -1 \text{ und} \quad (3.44c)$$

$$a_h a_{\uparrow\downarrow} = -1 \quad (3.44d)$$

für alle $n_{i,j}$ und l erfüllt ist. Zusammen mit (3.38) und (3.42) folgt

$$a_v a_h = -1, \quad (3.45a)$$

$$a_{\uparrow\downarrow} a_{\rightarrow\leftarrow} = -1, \quad (3.45b)$$

$$a_v a_{\rightarrow\leftarrow} = -1, \quad (3.45c)$$

$$a_h a_{\uparrow\downarrow} = -1, \quad (3.45d)$$

$$a_{\uparrow\rightarrow} a_{\downarrow\leftarrow} = -1 \text{ und} \quad (3.45e)$$

$$a_{\uparrow\leftarrow} a_{\downarrow\rightarrow} = 1 \quad (3.45f)$$

Die Lösung ist nicht eindeutig. Es steht uns also frei, $a_h = a_{\uparrow\leftarrow} = a_{\uparrow\rightarrow} = 1$ zu setzen, sodass sich die acht Konstanten zu

$$a_h = 1 \quad a_v = -1 \quad a_{\rightarrow\leftarrow} = 1 \quad a_{\uparrow\downarrow} = -1 \quad (3.46a)$$

$$a_{\uparrow\leftarrow} = 1 \quad a_{\downarrow\rightarrow} = 1 \quad a_{\uparrow\rightarrow} = 1 \quad a_{\downarrow\leftarrow} = -1 \quad (3.46b)$$

bestimmen lassen.

Mit (3.34) führt dies schließlich zu der von Samuel [Sam1] aufgestellten Zustandssumme

$$Z = 2^N \cosh^{2N}(\beta J) \int \mathcal{D}\eta \exp\{S(\eta)\}, \quad (3.47)$$

$$S(\eta) = \sum_{x,y} \left[t (\eta_{x,y}^{\rightarrow} \eta_{x+1,y}^{\leftarrow} - \eta_{x,y}^{\uparrow} \eta_{x,y+1}^{\downarrow}) \right. \\ \left. + \eta_{x,y}^{\uparrow} \eta_{x,y}^{\rightarrow} + \eta_{x,y}^{\uparrow} \eta_{x,y}^{\leftarrow} + \eta_{x,y}^{\downarrow} \eta_{x,y}^{\rightarrow} - \eta_{x,y}^{\downarrow} \eta_{x,y}^{\leftarrow} \right. \\ \left. - \eta_{x,y}^{\uparrow} \eta_{x,y}^{\downarrow} + \eta_{x,y}^{\rightarrow} \eta_{x,y}^{\leftarrow} \right]. \quad (3.48)$$

Die negativen Vorzeichen können durch Vertauschen der Graßmann-Variablen eliminiert werden; es bedeutet nichts anderes als ein Richtungswechsel. Graphisch kann dies wie in Abb. 3.6 durch Pfeile symbolisiert werden.

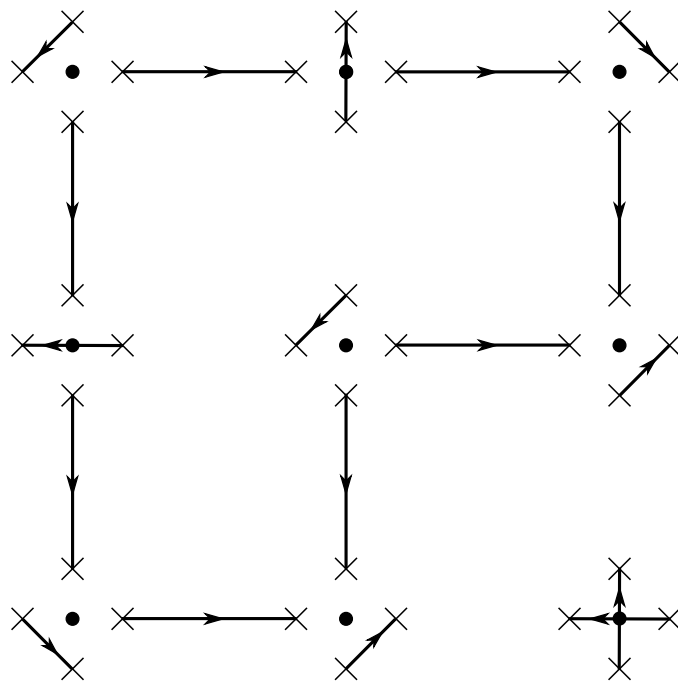


Abbildung 3.6.: Darstellung der Bloch-Wände, Ecken und Monomere durch Pfeile. Die Richtung gibt die Reihenfolge der Graßmann-Variablen an.

3.4. Berechnung der Zustandssumme

Die Auflösung des Integrals (3.47) gestaltet sich im Ortsraum als schwierig. Dies liegt daran, dass die den Bloch-Wänden zugehörigen Terme der Wirkung von Graßmann-Variablen verschiedener Gitterpunkte abhängen. Zur Berechnung des Integrals wechseln wir daher durch diskrete Fourier-Transformation

$$\eta_{x,y}^{(i)} = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{n=-L_x}^{L_x} \sum_{m=-L_y}^{L_y} \exp\left\{i(xp_x(n) + yp_y(m))\right\} \zeta_{p_x,p_y}^{(i)} \quad (3.49)$$

mit periodischen Randbedingungen

$$p_x(n) = \frac{2\pi n}{2L_x + 1} \quad \text{und} \quad p_y(m) = \frac{2\pi m}{2L_y + 1} \quad (3.50)$$

in den Impulsraum mit den neuen Graßmann-Variablen $\zeta_{p_x,p_y}^{(i)}$. $(2L_x/y + 1)$ ist wie zuvor die Anzahl der Ising-Spins in x/y -Richtung. Die Funktionaldeterminante ist 1,

$$\mathcal{D}\eta = \mathcal{D}\zeta, \quad (3.51)$$

da das Integral für alle t , also auch $t = 0$, gleich sein muss.

Nun werden die Terme der Samuel-Wirkung (3.48) fouriertransformiert. Beispielsweise gilt für

$$\begin{aligned} \sum_{x,y} \eta_{x,y}^{\rightarrow} \eta_{x+1,y}^{\leftarrow} &= \\ &= \frac{1}{N} \sum_{x,y} \left(\sum_{n,m} e^{i[xp_x(n) + yp_y(m)]} \zeta_{p_x,p_y}^{\rightarrow} \right) \left(\sum_{n',m'} e^{i[(x+1)p'_x(n') + yp'_y(m')]} \zeta_{p'_x,p'_y}^{\leftarrow} \right) \\ &= \frac{1}{N} \sum_{\substack{n,m \\ n',m'}} e^{ip'_x(n')} \zeta_{p_x,p_y}^{\rightarrow} \zeta_{p'_x,p'_y}^{\leftarrow} \sum_{x,y} \left(e^{i[x(p_x+p'_x) + y(p_y+p'_y)]} \right). \end{aligned}$$

Mit

$$\sum_x e^{\frac{2\pi i}{2L_x+1}(n+n')x} = (2L_x + 1) \delta_{n,-n'} \quad (3.52)$$

(siehe Anhang B.3) folgt schließlich

$$\begin{aligned}
\sum_{x,y} \eta_{x,y}^{\rightarrow} \eta_{x+1,y}^{\leftarrow} &= \frac{1}{N} \sum_{\substack{n,m \\ n',m'}} e^{ip'_x(n')} \zeta_{p_x,p_y}^{\rightarrow} \zeta_{p'_x,p'_y}^{\leftarrow} N \delta_{n,-n'} \delta_{m,-m'} \\
&= \sum_{n,m} e^{-ip_x(n)} \zeta_{p_x,p_y}^{\rightarrow} \zeta_{-p_x,-p_y}^{\leftarrow}, \text{ bzw.} \\
&= \sum_{n',m'} e^{ip'_x(n')} \zeta_{-p'_x,-p'_y}^{\rightarrow} \zeta_{p'_x,p'_y}^{\leftarrow},
\end{aligned} \tag{3.53}$$

oder um es in eine antisymmetrische Form zu bringen

$$\sum_{x,y} \eta_{x,y}^{\rightarrow} \eta_{x+1,y}^{\leftarrow} = \frac{1}{2} \sum_{n,m} \left(e^{-ip_x(n)} \zeta_{p_x,p_y}^{\rightarrow} \zeta_{-p_x,-p_y}^{\leftarrow} - e^{ip_x(n)} \zeta_{p_x,p_y}^{\leftarrow} \zeta_{-p_x,-p_y}^{\rightarrow} \right). \tag{3.54}$$

Die anderen Terme berechnen sich analog, sodass wir die transformierte Wirkung

$$\begin{aligned}
S(\zeta) &= \sum_{n,m} \left[(te^{-ip_x} + 1) \zeta_{p_x,p_y}^{\rightarrow} \zeta_{-p_x,-p_y}^{\leftarrow} - (te^{-ip_y} + 1) \zeta_{p_x,p_y}^{\uparrow} \zeta_{-p_x,-p_y}^{\downarrow} \right. \\
&\quad \left. + \zeta_{p_x,p_y}^{\uparrow} \zeta_{-p_x,-p_y}^{\rightarrow} + \zeta_{p_x,p_y}^{\uparrow} \zeta_{-p_x,-p_y}^{\leftarrow} + \zeta_{p_x,p_y}^{\downarrow} \zeta_{-p_x,-p_y}^{\rightarrow} - \zeta_{p_x,p_y}^{\downarrow} \zeta_{-p_x,-p_y}^{\leftarrow} \right], \tag{3.55}
\end{aligned}$$

mit

$$Z = 2^N \cosh^{2N}(K) \int \mathcal{D}\zeta e^{S(\zeta)} \tag{3.56}$$

erhalten. Die einzelnen Terme von S bestehen nun nicht mehr aus Graßmann-Variablen verschiedener Gitterpunkte. In der Form (3.54) lässt sich die Wirkung nun

$$S(\zeta) = \frac{1}{2} \sum_{n,m} \zeta_{p_x,p_y}^T B \zeta_{-p_x,-p_y} \tag{3.57}$$

schreiben, mit den Vektoren $\zeta = (\zeta_{\leftarrow}, \zeta_{\rightarrow}, \zeta_{\downarrow}, \zeta_{\uparrow})^T$ und der Matrix

$$B(p_x, p_y) = \begin{pmatrix} 0 & -(1 + te^{ip_x}) & 1 & -1 \\ 1 + te^{-ip_x} & 0 & -1 & -1 \\ -1 & 1 & 0 & 1 + te^{ip_y} \\ 1 & 1 & -(1 + te^{-ip_y}) & 0 \end{pmatrix}. \tag{3.58}$$

Damit haben wir die Zustandssumme in die Form einer Determinante nach (3.24) gebracht. Unter Berücksichtigung, die (p_x, p_y) und $(-p_x, -p_y)$ nicht doppelt zu zählen, ergibt sich

$$Z(\beta) = 2^N \cosh^{2N}(K) \sqrt{\prod_{n,m} \det B(p_x, p_y)},$$

was nach Berechnung der Determinante die Form der Zustandssumme nach Onsager [Ons] bringt:

$$Z(\beta) = 2^N \cosh^{2N}(\beta J) \sqrt{\prod_{n,m} [(1+t^2)^2 - 2t(1-t^2)(\cos p_x + \cos p_y)]}. \quad (3.59)$$

3.5. Freie Energie

Für physikalische Anwendungen ist der Übergang zur Thermodynamik relevant. Die freie Energie berechnet sich nach (2.13) aus dem thermodynamischen Limes

$$\begin{aligned} F(T) &= - \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{N} k_B T \ln Z \\ &= -k_B T \left[\ln 2 + 2 \ln(\cosh(K)) + \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{2N} \sum_{n,m} \ln[(1+t^2)^2 - 2t(1-t^2)(\cos p_x + \cos p_y)] \right]. \end{aligned} \quad (3.60)$$

Dabei überführen wir die Summe nach (3.50) mit $\Delta p_x \Delta p_y = \frac{4\pi^2}{N}$ in ein Doppelintegral

$$\sum_{n,m} \xrightarrow{N \rightarrow \infty} \frac{N}{4\pi^2} \int_{-\pi}^{\pi} dp_x dp_y \quad (3.61)$$

sodass wir für die freie Energie den Ausdruck

$$\begin{aligned} F(T) &= -k_B T \left[\ln 2 + 2 \ln(\cosh(K)) \right. \\ &\quad \left. + \frac{1}{8\pi^2} \int_{-\pi}^{\pi} dp_x dp_y \ln[(1+t^2)^2 - 2t(1-t^2)(\cos p_x + \cos p_y)] \right] \\ &= -\frac{k_B T}{8\pi^2} \int_{-\pi}^{\pi} dp_x dp_y \ln[4 \cosh^2(2K) - 4 \sinh(2K)(\cos p_x + \cos p_y)] \end{aligned} \quad (3.62)$$

erhalten.

Einen Phasenübergang erwarten wir, wenn das Argument im Logarithmus gegen Null läuft. Der rechte Summand ist bis auf an den Rändern der Brillouin-Zone, $|p_x| = |p_y| = \pi$, und bei $|p_x| = |p_y| = 0$ stets kleiner als der linke. Dort besitzt $(\cosh^2(2K) - 2 \sinh(2K)) = (1 - \sinh(2K))^2$ einen Nullpunkt bei

$$\beta_C J = \frac{1}{2} \operatorname{arcsinh}(1) = \frac{1}{2} \ln(1 + \sqrt{2}) = 0,440686794. \quad (3.63)$$

Der Verlauf der freien Energie ist stetig. In ihrer zweiten Ableitung zeigt sich jedoch eine logarithmische Divergenz, was durch eine Taylor-Entwicklung des Integrals (3.62) um K_c sichtbar wird. Die von Onsager berechnete spezifische Wärme ist in Abb. 3.7 aufgezeigt.

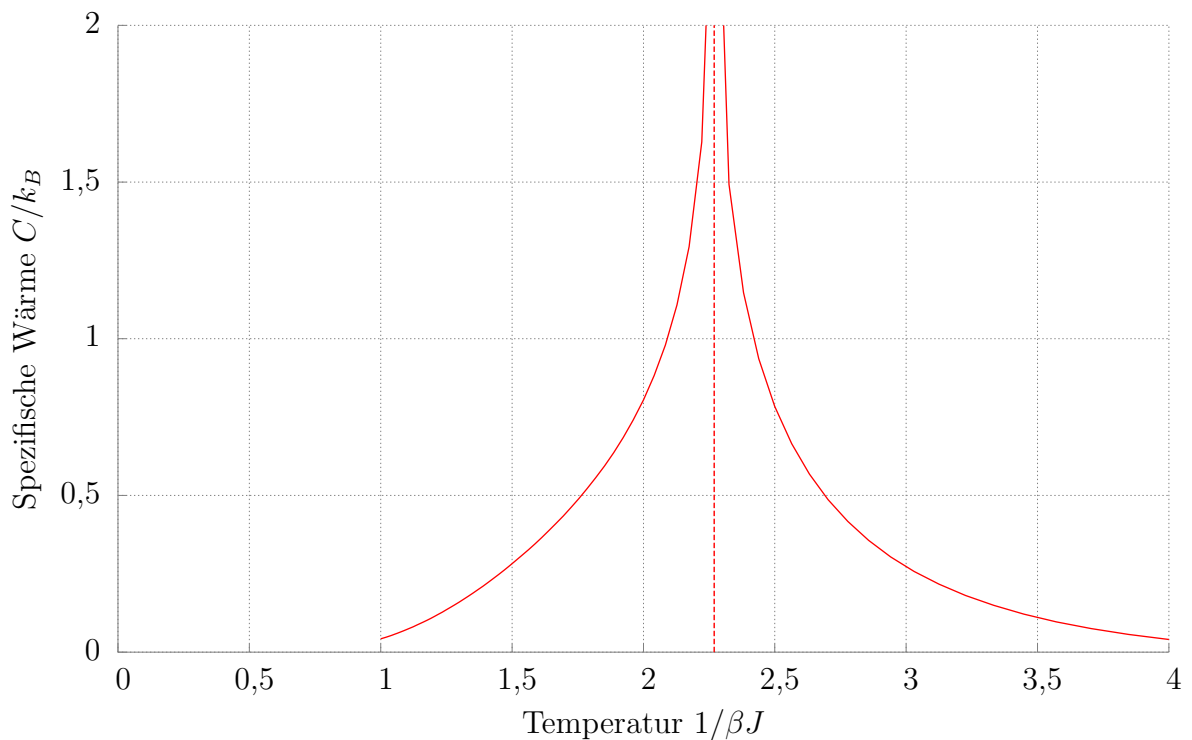


Abbildung 3.7.: Spezifische Wärme C nach Onsager [Ons].

4. Numerische Berechnung der kritischen Temperatur

Abseits des vorherigen Kapitels wollen wir die kritische Temperatur nun auf eine andere Art abschätzen. Der naive Weg wäre, alle 2^N Terme zu summieren. Da nahe der kritischen Temperatur die Korrelationslänge ξ der Ising-Spins nach (2.15) sehr groß ist [Wil], müsste \sqrt{N} in derselben Größenordnung gewählt werden, um eine gute Approximation des thermodynamischen Limes zu geben. Dies ist in keiner sinnvollen Rechenzeit durchführbar.

4.1. Renormierungsgruppe

Das Problem wird gelöst, indem wir das Ising-Gitter renormieren, das heißt, auf eine andere Größe abbilden. Die Ortsraum-Renormierungsgruppe (RG) beschreibt die Transformation auf ein kleineres Ising-Gitter mit dafür geeigneten Methoden (Die RG ist aufgrund des Verlustes von Freiheitsgraden strenggenommen eine Halbgruppe). Diese werden unter anderem in [MarKad], [Nol6] und [Kad] behandelt.

Betrachten wir erneut die Zustandssumme

$$Z = \sum_{\{\sigma\}} \prod_{i,j} \exp[K\sigma_i\sigma_j] \quad (4.1)$$

des Ising-Modells an einem Aufpunkt (x, y) mit seinen vier nächsten Nachbarn:

$$Z = \sum_{\{\sigma\}} \exp[K(\cdots + \sigma_{x-1,y}\sigma_{x,y} + \sigma_{x,y-1}\sigma_{x,y} + \sigma_{x,y}\sigma_{x+1,y} + \sigma_{x,y}\sigma_{x,y+1} + \cdots)]. \quad (4.2)$$

Wir klammern $\sigma_{x,y}$ aus und können daher dessen Summierung ausführen. Die Zustandssumme vereinfacht sich zu

$$Z = \sum_{\{\sigma\}'} \dots \left[e^{K(\sigma_{x-1,y} + \sigma_{x,y-1} + \sigma_{x+1,y} + \sigma_{x,y+1})} + e^{-K(\sigma_{x-1,y} + \sigma_{x,y-1} + \sigma_{x+1,y} + \sigma_{x,y+1})} \right] \dots \quad (4.3)$$

Wir haben mit diesen Wechselwirkungen ein „Kreuz“ des Gitters abgehandelt. Wir können dies nun für alle anderen Kreuze wiederholen, sodass die Hälfte der Summierungen durchgeführt wird. Es bleibt damit die Summe über die Spins eines zu 45° zum ursprünglichen Gitter verdrehten quadratischen Gitters (siehe Abb. 4.1).

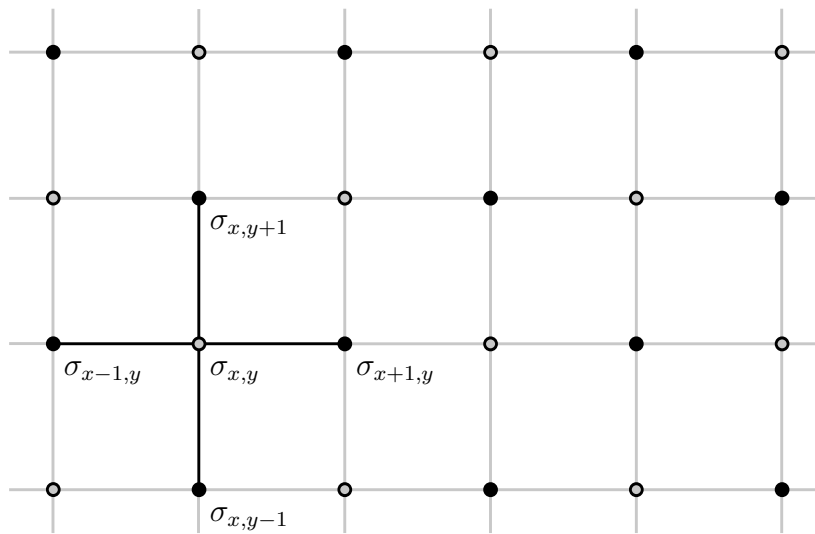


Abbildung 4.1.: Umsortierung der Spin-Spin-Wechselwirkungen zu "Kreuzen". Dadurch lässt sich die Hälfte der Spin-Summierungen ausführen (weiße Kreise). Die übrigen (schwarzen) Spins formen ein um 45° verschobenes, jedoch ebenso quadratisches Gitter.

Idealerweise könnte Z nun in eine Form wie (4.1) gebracht werden - mit der Hälfte der Spins und einer neuen Kopplungskonstanten K' . Es kommen jedoch noch weitere Terme vor. [Wil] Es finden sich neue Kopplungen K'_i , sodass

$$\begin{aligned} & e^{K(\sigma_{x-1,y} + \sigma_{x,y-1} + \sigma_{x+1,y} + \sigma_{x,y+1})} + e^{-K(\sigma_{x-1,y} + \sigma_{x,y-1} + \sigma_{x+1,y} + \sigma_{x,y+1})} \\ &= \exp \left[\frac{K'_1}{2} (\sigma_{x-1,y} \sigma_{x,y-1} + \sigma_{x,y-1} \sigma_{x+1,y} + \sigma_{x+1,y} \sigma_{x,y+1} + \sigma_{x,y+1} \sigma_{x-1,y}) \right. \\ & \quad \left. + K'_2 (\sigma_{x-1,y} \sigma_{x+1,y} + \sigma_{x,y-1} \sigma_{x,y+1}) + K'_3 \sigma_{x-1,y} \sigma_{x,y-1} \sigma_{x+1,y} \sigma_{x,y+1} + K'_4 \right]. \end{aligned} \quad (4.4)$$

Daraus folgt für die möglichen Kombinationen der $\sigma = \pm 1$:

$$e^{4K} + e^{-4K} = e^{2K'_1+2K'_2+K'_3+K'_4}, \quad (4.5a)$$

$$2 = e^{-2K'_1+2K'_2+K'_3+K'_4}, \quad (4.5b)$$

$$e^{2K} + e^{-2K} = e^{-3K'_3+K'_4} \text{ und} \quad (4.5c)$$

$$2 = e^{-2K'_2+K'_3+K'_4}. \quad (4.5d)$$

Daraus finden sich direkt

$$K'_1 = \frac{1}{4} \ln(\cosh(4K)), \quad (4.6a)$$

$$K'_2 = \frac{1}{8} \ln(\cosh(4K)), \quad (4.6b)$$

$$K'_3 = \frac{1}{8} \ln(\cosh(4K)) - \frac{1}{4} \ln(\cosh(2K)) \text{ und} \quad (4.6c)$$

$$K'_4 = \ln 2 + \frac{1}{2} \ln(\cosh(2K)) + \frac{1}{8} \ln(\cosh(4K)) =: \ln(g(K)). \quad (4.6d)$$

Bezüge man nur die Kopplung K'_1 der nächsten Nachbarn (NN) mit ein, würde es sich wieder um die Zustandssumme eines Ising-Modells mit $N/2$ Spins handeln. Hinzu kommen jedoch zusätzliche Bindungen zwischen übernächsten Nachbarn (NNN) des neuen Gitters mit Kopplung K'_2 und die Bindung zwischen allen vier Spins des Quadrats mit Kopplung K'_3 (Abb. 4.2). K'_4 kann als konstanter Term aus der Summe gezogen werden, ist also unproblematisch.

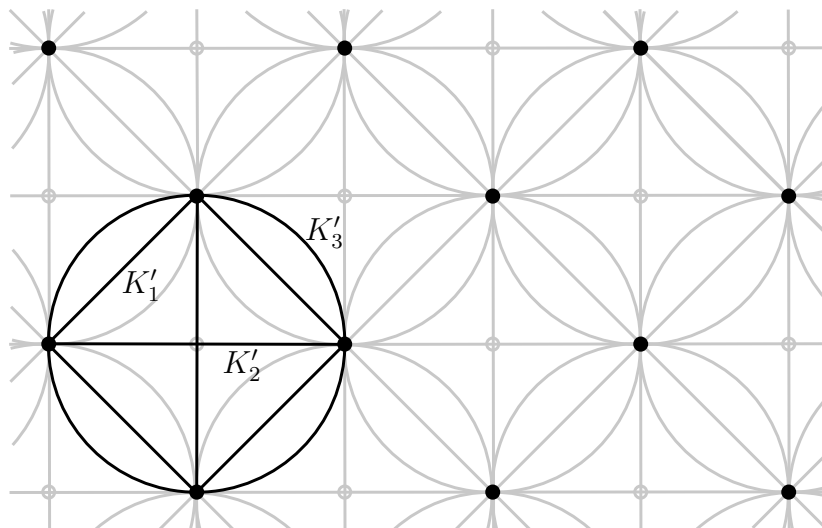


Abbildung 4.2.: Das neue Gitter mit den drei Bindungen K'_1 , K'_2 und K'_3 .

Um das Modell auf immer kleiner werdende Modelle zu überführen, müssen wir also Wege finden, dass pro Renormierung keine Kopplungen hinzukommen. Wir werden im Folgenden drei Möglichkeiten untersuchen.

4.2. Nur Nächstnachbar-Wechselwirkungen

Die simpelste Möglichkeit, die störenden Kopplungen K'_2 und K'_3 zu beseitigen, ist, sie gleich 0 zu setzen. Übrig bleibt dementsprechend nur die NN-Wechselwirkungen des neuen Gitters $K' := K'_1$. Damit vereinfacht sich die Zustandssumme nach (4.4) zu

$$\begin{aligned}
Z(N, K) &= \sum_{\{\sigma\}'} \dots \left[e^{K(\sigma_{x-1,y} + \sigma_{x,y-1} + \sigma_{x+1,y} + \sigma_{x,y+1})} + e^{-K(\sigma_{x-1,y} + \sigma_{x,y-1} + \sigma_{x+1,y} + \sigma_{x,y+1})} \right] \dots \\
&= \sum_{\{\sigma\}'} \dots g(K) \exp \left[\frac{K'}{2} (\sigma_{x-1,y} \sigma_{x,y-1} + \sigma_{x,y-1} \sigma_{x+1,y} + \sigma_{x+1,y} \sigma_{x,y+1} + \sigma_{x,y+1} \sigma_{x-1,y}) \right] \dots \\
&= g(K)^{\frac{N}{2}} Z(N/2, K') \tag{4.7}
\end{aligned}$$

Über die freie Energie F wissen wir, dass diese als extensive Größe proportional zu N ist, sodass wir ein $f(K)$ definieren können mit

$$F \propto \ln(Z(N, K)) =: f(K) \cdot N. \tag{4.8}$$

Einsetzen von (4.7) liefert

$$\begin{aligned}
f(K) &= \frac{1}{N} \ln Z = \frac{1}{N} \ln \left[g(K)^{\frac{N}{2}} Z(N/2, K') \right] \\
&\stackrel{(4.6d)}{=} \frac{1}{2} \left[\ln \left(2 \cosh^{\frac{1}{2}}(2K) \cosh^{\frac{1}{8}}(4K) \right) + f(K') \right] \\
&\stackrel{(4.6a)}{=} \frac{1}{2} \ln(2) + \frac{1}{4} \ln \left[\cosh \left(\frac{1}{2} \operatorname{arcosh} \left(e^{4K'} \right) \right) \right] + \frac{1}{4} K' + \frac{1}{2} f(K') \\
&= \frac{3}{8} \ln(2) + \frac{1}{4} K' + \frac{1}{8} \ln \left(e^{4K'} + 1 \right) + \frac{1}{2} f(K'). \tag{4.9}
\end{aligned}$$

Zusammenfassend erhalten wir also die Rekursionsvorschrift

$$K_{n+1} = \frac{1}{4} \operatorname{arcosh} \left(e^{4K_n} \right) \quad \text{und} \tag{4.10a}$$

$$f_{n+1} = \frac{3}{8} \ln(2) + \frac{1}{4} K_n + \frac{1}{8} \ln \left(e^{4K_n} + 1 \right) + \frac{1}{2} f_n. \tag{4.10b}$$

Wir benötigen ein K_0 und f_0 als Startwert. Dazu machen wir uns klar, dass kleine K hohe Temperaturen bzw. eine schwache Bindung zwischen den Spins bedeuten. Für freie Teilchen ist die Zustandssumme dann die Anzahl der Konfigurationsmöglichkeiten $Z \approx 2^N$. Nach (4.8) ist dann

$$K_0 \ll 1 \quad \Rightarrow \quad f_0 = \ln 2 \quad (4.11)$$

In Abb. 4.3 ist der sog. Renormierungsfluss, d.h. die Änderung von K_n , dieses Modells eingezeichnet. Es ist zu sehen, dass die Trajektorie gegen ∞ strebt. Die einzigen Punkte, an denen sich K also nicht ändert, sind die sog. Fixpunkte 0 und ∞ . Da es keinen besonderen Verlauf der K -Trajektorien gibt, ist die Approximation zur Bestimmung eines Phasenüberganges ungeeignet.

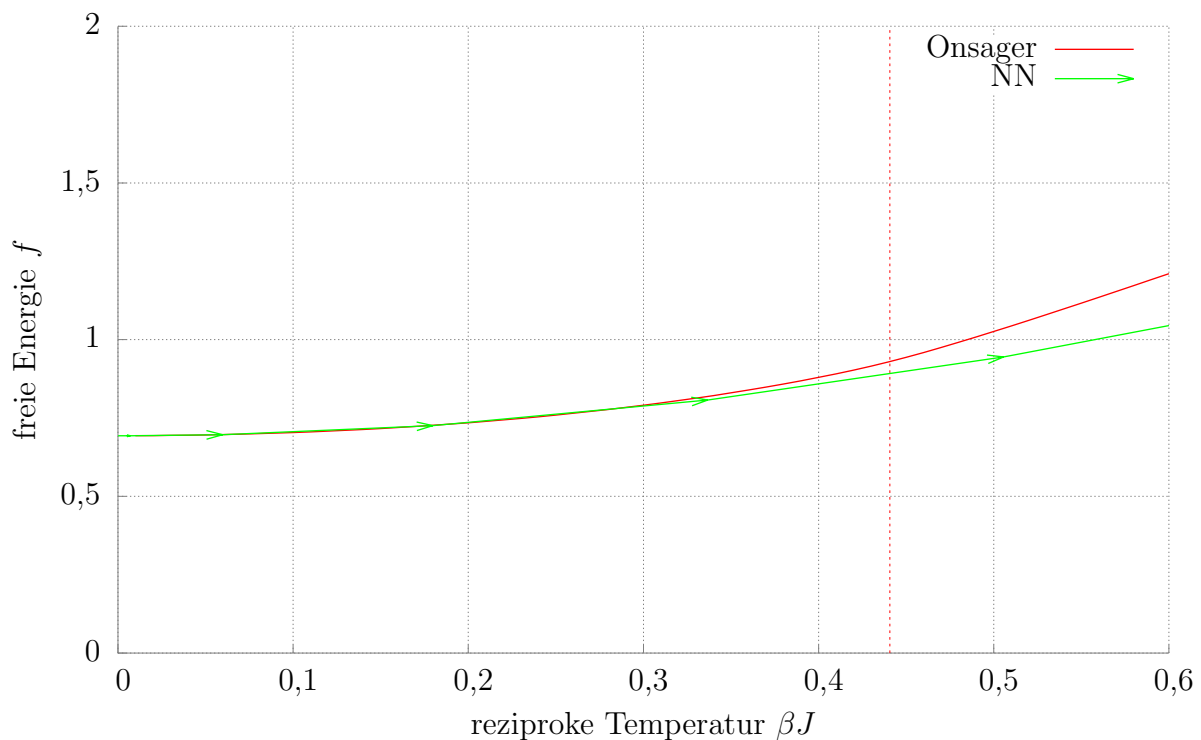


Abbildung 4.3.: RG-Fluss unter ausschließlicher Betrachtung der NN-Wechselwirkungen (grün). In rot ist Onsagers analytische Lösung [Ons] abgebildet. Die Kopplung $K = \beta J$ geht für $K > 0$ mit zunehmendem Iterationsschritt gegen ∞ . Die Fixpunkte sind somit 0 und ∞ . Die Approximation beschreibt also keinen Phasenübergang.

4.3. Wechselwirkung der übernächsten Nachbarn

Wir wollen nun die übernächsten Nachbarn miteinbeziehen. Für größer werdende Kopplungen K'_1 und K'_2 ordnen sich die Ising-Spins im Gitter stärker an, da beide nach (4.6a) und (4.6b) positiv sind. Jeder der $N/2$ Spins des Gitters besitzt 4 nächste und 4 übernächste Nachbarn. Es gibt also bei periodischen Randbedingungen jeweils genau $2 \cdot N$ Bindungen. Sind alle Spins gleich angeordnet, ist die Energie demnach mit

$$\beta E_{\min} = -NK' := -NK'_1 - NK'_2 = -\frac{3N}{8} \ln(\cosh(4K)) \quad (4.12)$$

minimiert. K' ist also so definiert, dass bei $T = 0$ die Energien übereinstimmen. Wir nehmen nun an, dass dies die Kopplung des Gitters ist. Für festes K' verringert sich also K'_1 , wenn K'_2 erhöht wird, und andersherum. Außerdem gelte dann wieder (4.7) mit dem neuen K' und damit die rekursiven Gleichungen

$$K_{n+1} = \frac{1}{4} \operatorname{arcosh}\left(e^{\frac{8}{3}K_n}\right) \quad \text{und} \quad (4.13a)$$

$$f_{n+1} = \frac{8}{3} \ln(2) + \frac{1}{6} K_n + \frac{1}{8} \ln\left[e^{\frac{8}{3}K_n} + 1\right] + \frac{1}{2} f_n. \quad (4.13b)$$

Führen wir mit den Startwerten (4.11) die Rekursion (4.13a) für einige Iterationsschritte durch, nimmt die Folge einen Grenzwert bei $K = 0,5070$ an. Es gibt demnach einen Punkt, an dem $K_{n+1} = K_n$. Im Gegensatz zum ersten Beispiel existiert also ein Schnittpunkt bei

$$\frac{1}{4} \operatorname{arcosh}\left(e^{\frac{8}{3}K^*}\right) = K^* = \beta^* J = 0.506981019, \quad (4.14)$$

an dem K_n fixiert ist und kleine Abweichungen von ihm „wegfließen“. Für $K_n > K^*$ formen wir (4.13) dementsprechend unter Vertauschung von K_n und K_{n+1} zu

$$K_{n+1} = \frac{3}{8} \ln \cosh(4K_n) \quad \text{und} \quad (4.15a)$$

$$f_{n+1} = 2f_n - \ln(2) - \frac{1}{2} \ln \cosh(2K_n) - \frac{1}{8} \ln \cosh(4K_n). \quad (4.15b)$$

um. Abb. 4.4 verdeutlicht den RG-Fluss des Modells.

Im Gegensatz zur ersten Approximation liefert die Einbeziehung der NNN-Wechselwirkungen einen zusätzlichen (instabilen) Fixpunkt K^* , den wir als kritischen Punkt K_c identifizieren: Für $T < T_c$ besteht das Gitter aus (makroskopisch) großen Bezirken gleichgerichteter Spins und nur kleinen abweichenden Inseln. Nach ei-

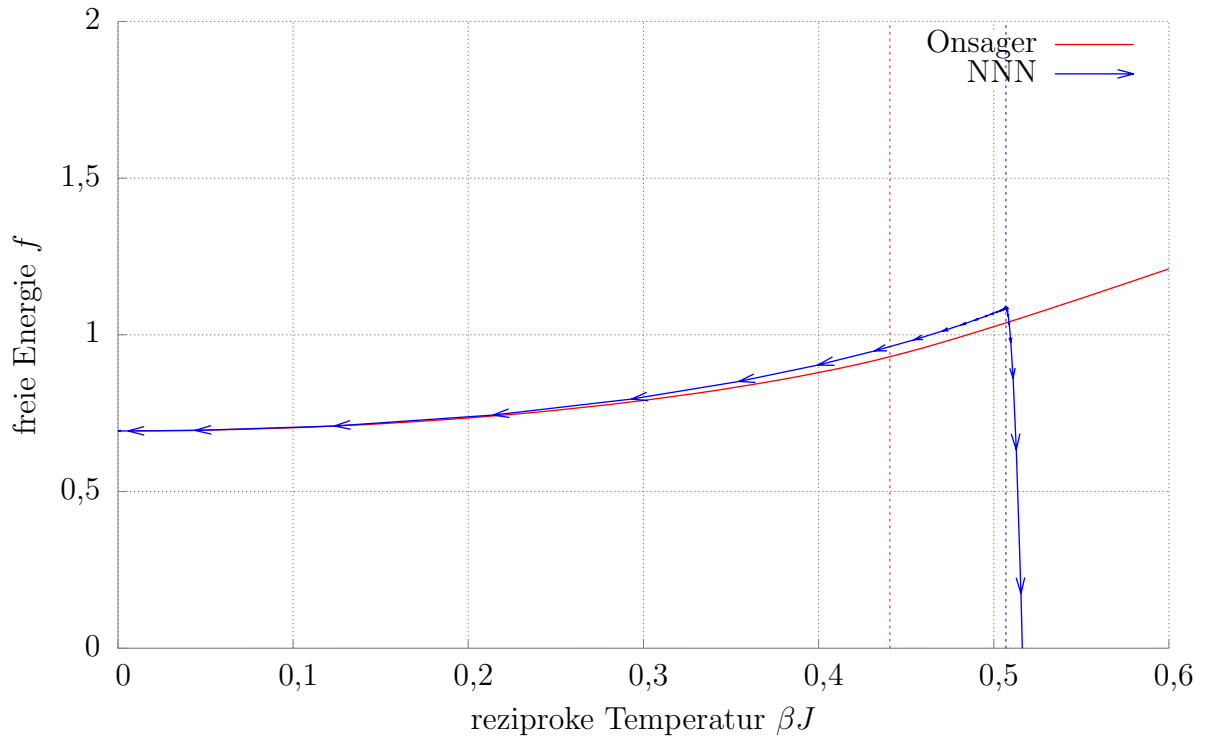


Abbildung 4.4.: RG-Fluss unter Betrachtung der NN-/ und NNN-Wechselwirkungen. Die Kopplung $K = \beta J$ geht unterhalb eines bestimmten Punktes $K_c = 0,5070$ mit zunehmendem Iterationsschritt gegen 0, oberhalb gegen ∞ (In (4.13a) bzw. (4.15a) ist es genau andersherum formuliert, um zu diesem Punkt zu gelangen). Die gestrichelten senkrechten Linien deuten die kritische Temperatur an.

nem Renormierungsschritt wird die Größe der Inseln halbiert, als ob T weiter verringert wird - genauso, wie das Verhalten von $K < K^*$. Bei $T = T_c$ verändert sich das Bild nicht. Für $T > T_c$ werden existierende Domänen weiter so verkleinert, als ob T erhöht wird.

Der errechnete Wert der kritischen inversen Temperatur kommt dem analytischen Ergebnis bereits sehr nahe. Die relative Abweichung ist mit

$$\frac{\beta_c^{\text{Ons}} - \beta_c^{\text{NNN}}}{\beta_c^{\text{Ons}}} = 0,15 \quad (4.16)$$

für diese starke Approximation erstaunlich gering.

4.4. Blockspin-Transformation mittels Mehrheitsregel

Für die nächste Methode betrachten wir wieder das ursprüngliche Ising-Gitter. Das Gitter wird in einzelne quadratische Blöcke unterteilt, die L^2 Spins σ beinhalten. Jedem Block wird nun ein Blockspin σ' zugeordnet, sodass wir ein neues, verdünntes Gitter erhalten. Der Blockspin hängt von der Stellung der sich darin befindenden Einzelspins ab. In der Nähe des kritischen Bereiches ist ξ viel größer als die Länge der einzelnen Blöcke, sodass die Spins eines Bezirks vorwiegend gleichgestellt sein sollten. Die Blockspins verhalten sich demnach genauso wie die vorherigen Ising-Spins. Wir gehen zunächst davon aus, dass $\sigma' = +1$, wenn die Mehrheit der $\sigma = +1$ sind und andersherum, und bei gleicher Anzahl beides zu 50% möglich ist (siehe Abb. 4.5).

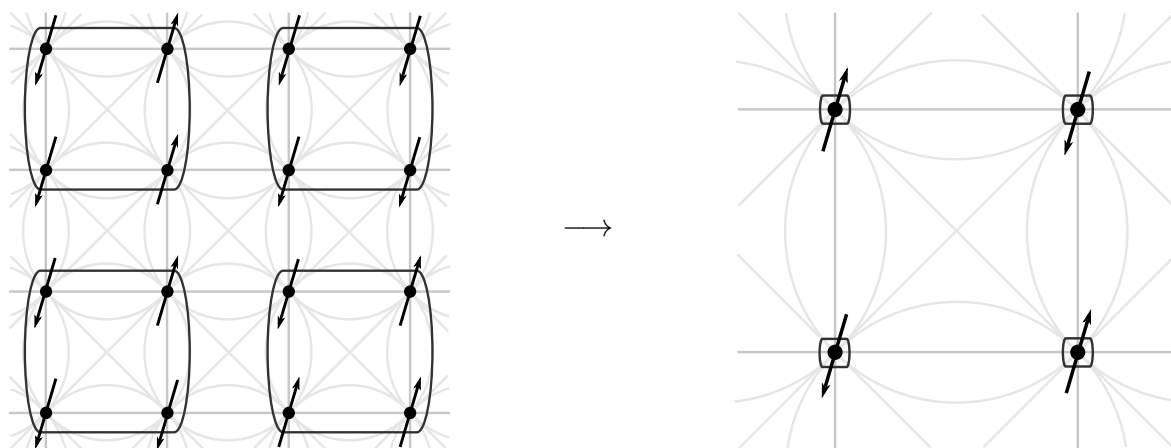


Abbildung 4.5.: Blockspin-Transformation eines Ising-Gitters in Blöcke von $L^2 = 2^2$ Spins. Den Blöcken wird ein neuer Blockspin, der dem mehrheitlichen Einzelspin entspricht, zugewiesen. Die rechte Abbildung ist eine von zwei Möglichkeiten: Der Block links oben kann gleich wahrscheinlich in $\sigma' = -1$ transformieren.

Die Wahrscheinlichkeitsverteilung $t(\sigma'_{x',y'}, \{\sigma_{x,y}\}_{\in x',y'})$ ist demnach

$$t(+1, \sum_{x,y \in x',y'} \sigma_{x,y} > 0) = 1, \quad (4.17a)$$

$$t(+1, \sum_{x,y \in x',y'} \sigma_{x,y} < 0) = 0, \quad (4.17b)$$

$$t(+1, \sum_{x,y \in x',y'} \sigma_{x,y} = 0) = 0.5, \quad (4.17c)$$

$$t(-1, \sum_{x,y \in x',y'} \sigma_{x,y} > 0) = 0, \quad (4.17d)$$

$$t(-1, \sum_{x,y \in x',y'} \sigma_{x,y} < 0) = 1, \quad (4.17e)$$

$$t(-1, \sum_{x,y \in x',y'} \sigma_{x,y} = 0) = 0.5. \quad (4.17f)$$

Die Wahrscheinlichkeit T , dass nach der Transformation eine bestimmte Konfiguration an Blockspins vorzufinden ist, ist dann das Produkt aus allen Wahrscheinlichkeiten t :

$$T(\{\sigma'\}, \{\sigma\}) = \prod_{x',y'} t(\sigma'_{x',y'}, \sum_{x,y \in x',y'} \sigma_{x,y}). \quad (4.18)$$

Die Energien des neuen Gitters werden über

$$e^{-\beta H'(\{\sigma'\})} = \sum_{\{\sigma\}} T(\{\sigma'\}, \{\sigma\}) e^{-\beta H(\{\sigma\})} \quad (4.19)$$

definiert. Durch diese Transformation bleibt die Zustandssumme unverändert, da die Summe über alle Wahrscheinlichkeiten T auf 1 normiert ist. [Kad]

Wir wollen uns nun auf ein 4×4 Gitter beschränken, dass wie in Abb. 4.5 in ein 2×2 Gitter transformiert wird, wie es auch in [Wip] getan wird. Das Gitter besitzt die vier Wechselwirkungen aus (4.4).

Die $2^{16} = 65536$ Spin-Konfigurationen der rechten Seite von (4.18) werden durch ein Computerprogramm erzeugt und die entsprechenden Transformationswahrscheinlichkeiten T berechnet. Auf der linken Seite bleibt das 2×2 Gitter mit $2^4 = 16$ Blockspin-Konfigurationen, aus denen sich vier verschiedene Energien

$$C_1 := -\beta H'(\begin{smallmatrix} ++ & -- \\ ++ & -- \end{smallmatrix}) = 8K_1 + 8K_2 + 4K_3 + 4K_4, \quad (4.20a)$$

$$C_2 := -\beta H'(\begin{smallmatrix} ++ & -- \\ +- & -+ \end{smallmatrix}, \dots) = -4K_3 + 4K_4, \quad (4.20b)$$

$$C_3 := -\beta H'(\begin{smallmatrix} ++ & +- \\ +- & ++ \end{smallmatrix}, \dots) = -8K_2 + 4K_3 + 4K_4 \text{ und} \quad (4.20c)$$

$$C_4 := -\beta H'(\begin{smallmatrix} +- & -+ \\ -+ & +- \end{smallmatrix}) = -8K_1 + 8K_2 + 4K_3 + 4K_4 \quad (4.20d)$$

errechnen (Rotation, Translation und Spinflip ändern die Energie nicht), die dann mit der rechten Seite gleichgesetzt werden. Die numerisch errechneten Werte der Konfigurationen C_i liefern umgestellt die neuen Kopplungen des renormierten Gitters

$$K_1 = \frac{1}{16}(C_1 - C_4), \quad (4.21a)$$

$$K_2 = \frac{1}{32}(C_1 - 2C_3 + C_4), \quad (4.21b)$$

$$K_3 = \frac{1}{32}(C_1 - 4C_2 + 2C_3 + C_4) \text{ und} \quad (4.21c)$$

$$K_4 = \frac{1}{32}(C_1 + 4C_2 + 2C_3 + C_4). \quad (4.21d)$$

Dieser Schritt kann nun beliebig wiederholt werden. Wird ein Startpunkt bei $T < T_c$ gewählt, fließt die Trajektorie zur 0. Für $T > T_c$ geht sie gegen ∞ . Die Menge aller Punkte, die zu einem Fixpunkt fließen, nennt sich kritische Fläche.[Wip] Wir starten bei $K_2 = K_3 = 0$ (K_4 ist als konstanter Faktor wieder unwichtig), da wir von einem Gitter mit nur NN-Wechselwirkungen ausgehen, und variieren K_1 . Der Schnittpunkt der K_1 -Achse mit der kritischen Fläche, also der Punkt, an dem die Trajektorie gegen den Fixpunkt gehen wird, wird die kritische Temperatur sein. In Abb. 4.6 und 4.7 sind die entsprechenden Flussdiagramme dargestellt.

Die auf diese Weise berechnete kritische Temperatur liegt bei

$$K_c = \beta_c J = 0.418197047, \quad (4.22)$$

deren relative Abweichung von der Onsagerlösung

$$\frac{\beta_c^{\text{Ons}} - \beta_c^{\text{MR}}}{\beta_c^{\text{Ons}}} = -0,05 \quad (4.23)$$

deutlich geringer als zuvor ist.

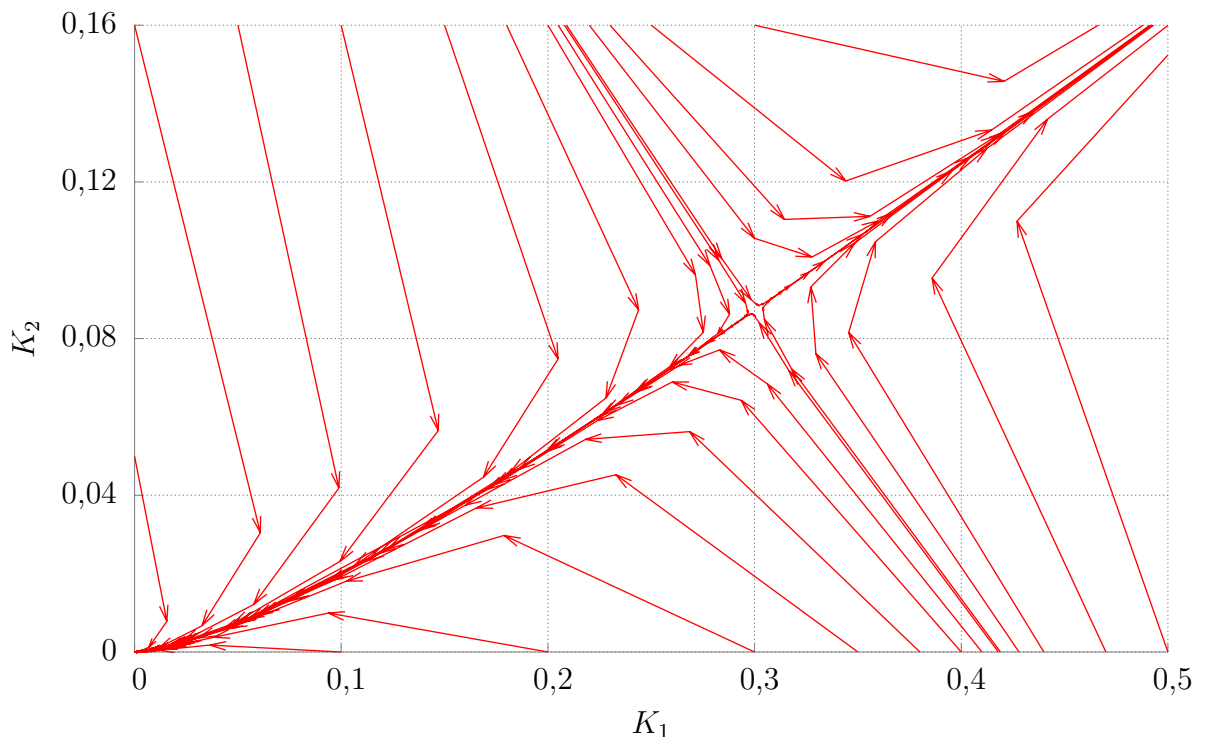
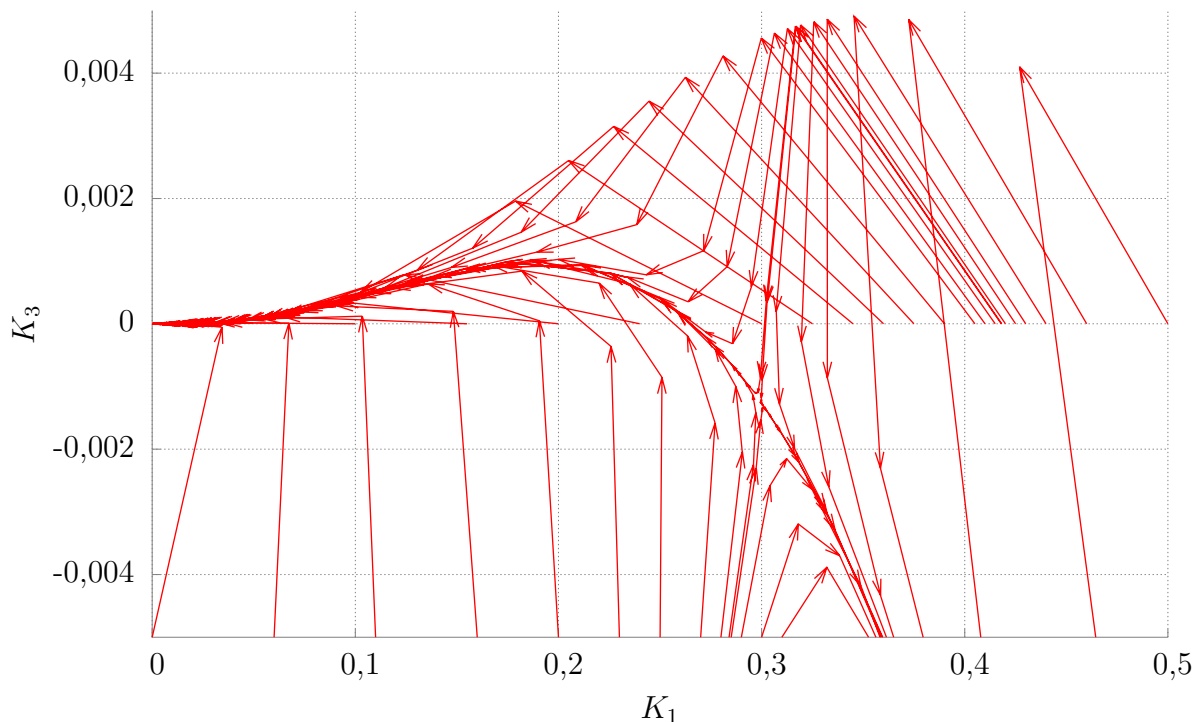


Abbildung 4.6.: RG-Fluss in der K_1 - K_2 -Ebene. Mit wachsendem Iterationsschritt streben die Werte nach 0 bzw. ∞ . Ab einem Startwert von $(K_1, K_2, K_3) = (0.418197, 0, 0)$ wechselt die Flussrichtung.

Abbildung 4.7.: RG-Fluss in der K_1 - K_3 -Ebene.

Die Größe der Blöcke lässt sich nicht sinnvoll vergrößern. Ein 9×9 Gitter ist mit 2^{81} Konfigurationen in keiner sinnvollen Zeit berechenbar, zudem gäbe es auf dem geblockten 3×3 Gitter wiederum 2^9 Konfigurationen, die wesentlich mehr unterschiedliche Energien als zuvor bilden, sowie neue Wechselwirkungen K_i .

Stattdessen ist es sinnvoll, die Wahrscheinlichkeitsverteilungen t zu variieren. Bisher sind wir von einer δ -förmigen Verteilung ausgegangen, in der drei Spins einem einzelnen immer überwiegen. Es zeigt sich, dass wenn $t(\pm 1, \mp 2)$ einer nicht verschwindenden Wahrscheinlichkeit zuordnet wird, die kritische Temperatur dieses Modells steigt. Wir wählen daher eine neue, kontinuierliche Verteilungsfunktion [Kad]

$$t(\sigma'_{x',y'}, \sum_{x,y \in x',y'} \sigma_{x,y}) = \frac{\exp(\alpha \sigma'_{x',y'} \sum_{x,y} \sigma_{x,y})}{2 \cosh(\alpha \sum_{x,y} \sigma_{x,y})}, \quad (4.24)$$

die für $\alpha \rightarrow \infty$ gegen die alte δ -Verteilung geht und die Voraussetzungen einer Wahrscheinlichkeit erfüllt. Wir können nun den Parameter α variieren, um das exakte Ergebnis zu reproduzieren (siehe Abb. 4.8).

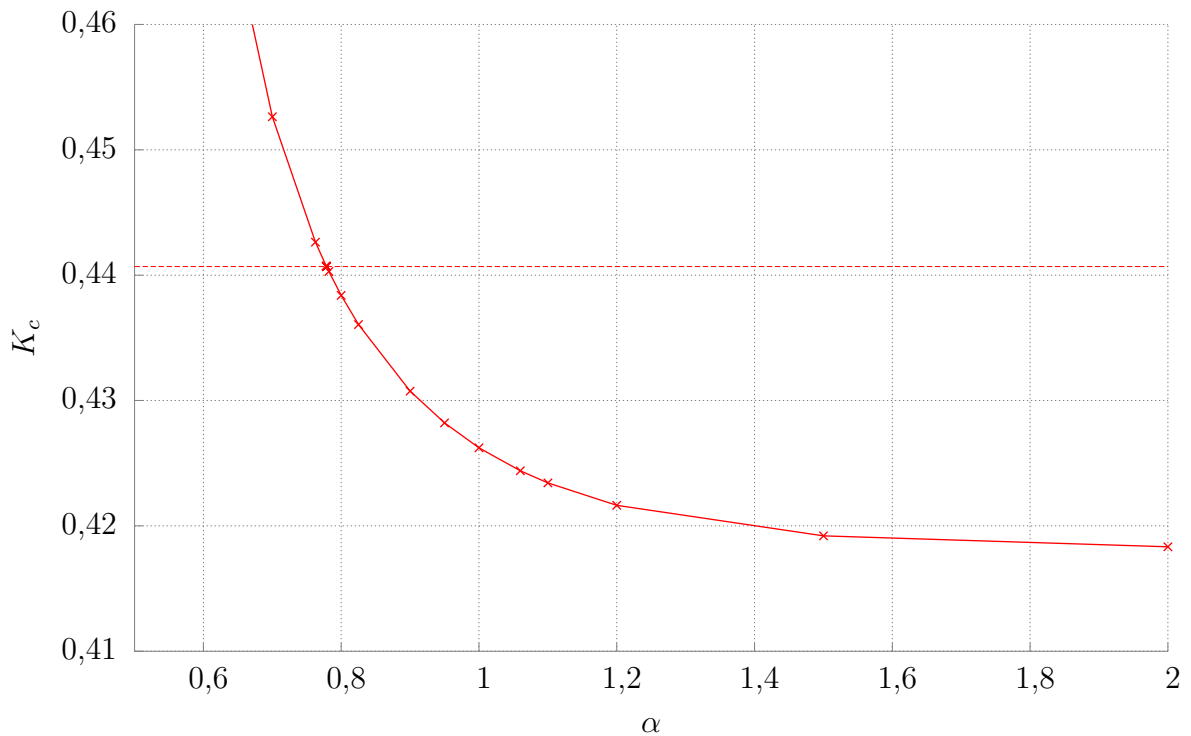


Abbildung 4.8.: Variation des Parameters α . Die gestrichelte Linie deutet die analytische kritische Temperatur T_c^{Ons} an. Der Schnittpunkt mit dem Temperaturverlauf liegt bei $\alpha \approx 0,7786057$.

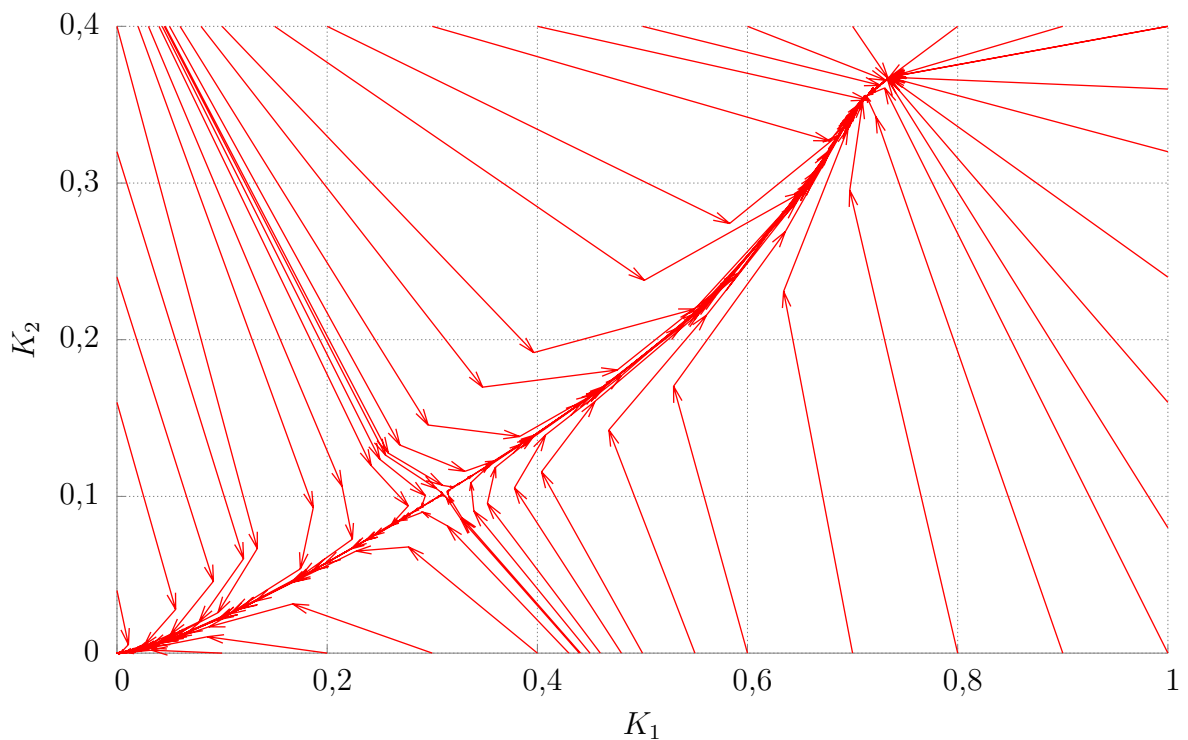


Abbildung 4.9.: RG-Fluss in der K_1 - K_2 -Ebene für $\alpha = 0,7786057$. Der Schnittpunkt mit der K_1 -Achse liegt wie erwartet nahe T_c^{Ons} . Auffällig ist, dass der Hochtemperatur-Fixpunkt nicht mehr bei ∞ liegt, sondern einen endlichen, stabilen Wert annimmt.

Durch die neue Verteilung tritt ein interessantes Phänomen auf: Der Hochtemperatur-Fixpunkt lag zuvor wie erwartet bei ∞ . Es existiert nun ein neuer attraktiver Fixpunkt bei einem endlichen Wert (siehe dazu Abb. 4.9). Dies entsteht dadurch, dass vier gleichgerichteten Ising-Spins nun nicht mehr immer derselbe Block-Spin zugeordnet wird: $\alpha = 0,7786$ bedeutet nicht nur, dass drei gleichgerichtete Spins einen einzelnen zu 95,7% überwiegen, sondern auch, dass vier gleiche Spins nur zu 99,8% zum selben Block-Spin transformieren. Angenommen, das Gitter ist größtenteils geordnet, $K > K_c$. Dann gibt es im Gegensatz zu vorher die Möglichkeit, dass aus vollständig geordneten Domänen gegengerichtete Spins hervorkommen. Das Gitter wird also nie vollständig geordnet, sodass K nicht gegen ∞ gehen kann.

5. Fazit

Das zweidimensionale Ising-Modell am quadratischen Gitter wurde mithilfe von Samuels Methode, die Zustandssumme als Integral über Graßmann-Variablen auszudrücken, gelöst. Das Ergebnis stimmt mit Onsagers Lösung überein:

$$\beta_c^{\text{Ons}} J = 0,440686794. \quad (5.1)$$

Die Methode bietet den Vorteil einer anschaulichen, graphischen Darstellung. Alle möglichen Polygone können durch drei Arten von Linien - Bloch-Wänden, Ecken und Monomeren - gezeichnet werden.

Die Techniken der Renormierungsgruppe liefern gute Näherungen der kritischen reziproken Temperatur. Sogar recht einfache Approximationen führen zu Ergebnissen, die nahe dem analytischen Wert liegen. Insbesondere die Blockspin-Transformation unter Anwendung der Mehrheitsregel sagt ein kritisches Verhalten bei

$$\beta_c^{\text{MR}} J = 0.418197047, \quad (5.2)$$

voraus. Das Modell weicht durch seine Vereinfachungen, wie die Beschränkung auf ein 4×4 Gitter und die δ -förmige Wahrscheinlichkeitsverteilung, vom analytischen Wert ab. Mithilfe einer kontinuierlichen Verteilung kann das exakte Ergebnis durch Parametervariation reproduziert werden.

Das zweidimensionale Ising-Modell dient aufgrund seiner exakten Lösbarkeit als Test der hier angewendeten RG-Methoden. Aufgrund ihrer Ergebnisse nahe des wahren Wertes können sie auf nicht exakt lösbare (bzw. bisher nicht exakt gelöste) Probleme angewendet werden.

A. Beispielpolygone

Wir wollen die Zustandssumme (3.47) kurz an zwei Beispielen testen. Als einfaches Beispiel wählen wir ein einfaches Quadrat aus vier Gitterpunkten (siehe Abb A.1).

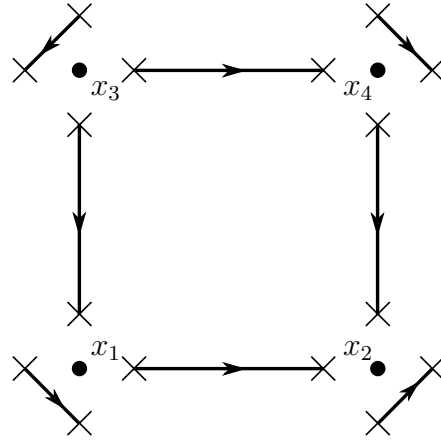


Abbildung A.1.: Beispiel 1.

Es gibt für jede der vier Bloch-Wände einen Faktor, sowie für jede der vier Kurven. Für das Integral in (3.47) gilt

$$\begin{aligned}
 \int \mathcal{D}\eta \exp\{S(\eta)\} &= \\
 &= \int \mathcal{D}\eta \exp\{t(\eta_1^{\rightarrow}\eta_2^{\leftarrow} + \eta_3^{\rightarrow}\eta_4^{\leftarrow} + \eta_3^{\downarrow}\eta_1^{\uparrow} + \eta_4^{\downarrow}\eta_2^{\uparrow}) + \eta_1^{\leftarrow}\eta_1^{\downarrow} + \eta_2^{\downarrow}\eta_2^{\rightarrow} + \eta_3^{\uparrow}\eta_3^{\leftarrow} + \eta_4^{\uparrow}\eta_4^{\rightarrow}\} \\
 &= \int \mathcal{D}\eta (1 + t\eta_1^{\rightarrow}\eta_2^{\leftarrow})(1 + t\eta_3^{\rightarrow}\eta_4^{\leftarrow})(1 + t\eta_3^{\downarrow}\eta_1^{\uparrow})(1 + t\eta_4^{\downarrow}\eta_2^{\uparrow}) \\
 &\quad (1 + \eta_1^{\leftarrow}\eta_1^{\downarrow})(1 + \eta_2^{\downarrow}\eta_2^{\rightarrow})(1 + \eta_3^{\uparrow}\eta_3^{\leftarrow})(1 + \eta_4^{\uparrow}\eta_4^{\rightarrow}).
 \end{aligned}$$

Jede Variable kommt genau einmal vor. Es überlebt daher nur der Term

$$\begin{aligned}
 \int \mathcal{D}\eta \exp\{S(\eta)\} &= \int \mathcal{D}\eta t^4 (\eta_1^\rightarrow \eta_2^\leftarrow)(\eta_3^\rightarrow \eta_4^\leftarrow)(\eta_3^\downarrow \eta_1^\uparrow)(\eta_4^\downarrow \eta_2^\uparrow)(\eta_1^\leftarrow \eta_1^\downarrow)(\eta_2^\downarrow \eta_2^\rightarrow)(\eta_3^\uparrow \eta_3^\leftarrow)(\eta_4^\uparrow \eta_4^\rightarrow) \\
 &= \int \mathcal{D}\eta t^4 (\eta_1^\rightarrow \eta_2^\leftarrow)(\eta_3^\rightarrow \eta_4^\leftarrow)(\eta_3^\downarrow \eta_1^\uparrow)(\eta_4^\downarrow \eta_2^\uparrow)(\eta_1^\leftarrow \eta_1^\downarrow)(\eta_2^\downarrow \eta_2^\rightarrow)(\eta_3^\uparrow \eta_3^\leftarrow)(\eta_4^\uparrow \eta_4^\rightarrow) \\
 &= t^4 \int \mathcal{D}\eta (\eta_1^\leftarrow \eta_1^\downarrow)(\eta_1^\rightarrow \eta_2^\leftarrow)(\eta_3^\downarrow \eta_1^\uparrow)(\eta_2^\downarrow \eta_2^\rightarrow)(\eta_4^\downarrow \eta_2^\uparrow)(\eta_3^\uparrow \eta_3^\leftarrow)(\eta_3^\rightarrow \eta_4^\leftarrow)(\eta_4^\uparrow \eta_4^\rightarrow) \\
 &= t^4 \int \mathcal{D}\eta (\eta_1^\leftarrow \eta_1^\downarrow \eta_1^\rightarrow \eta_1^\uparrow)(\eta_2^\leftarrow \eta_2^\downarrow \eta_2^\rightarrow \eta_2^\uparrow)(\eta_3^\downarrow \eta_3^\uparrow \eta_3^\leftarrow \eta_3^\rightarrow)(-\eta_4^\downarrow \eta_4^\leftarrow \eta_4^\uparrow \eta_4^\rightarrow) \\
 &= t^4 \int \mathcal{D}\eta (-\eta_1^\leftarrow \eta_1^\rightarrow \eta_1^\downarrow \eta_1^\uparrow)(-\eta_2^\leftarrow \eta_2^\rightarrow \eta_2^\downarrow \eta_2^\uparrow)(\eta_3^\leftarrow \eta_3^\rightarrow \eta_3^\downarrow \eta_3^\uparrow)(\eta_4^\leftarrow \eta_4^\rightarrow \eta_4^\downarrow \eta_4^\uparrow) \\
 &= +t^4,
 \end{aligned}$$

also genau der Term, den wir für ein Polygon mit vier Linien / Bloch-Wänden erwarten. In den Schritten wurden die Variablen nur so umsortiert, um sie nacheinander zu integrieren. Hier wurden z.B. die Variablen zuerst nach den Zahlen 1-4 sortiert, indem die größeren Variablen immer weiter nach rechts geschoben wurden, was jeweils eine -1 erzeugt und anschließend nach dem Ort.

Als zweites Beispiel nehmen wir ein etwas komplizierteres Polygon mit Knotenpunkt und einem Monomer.

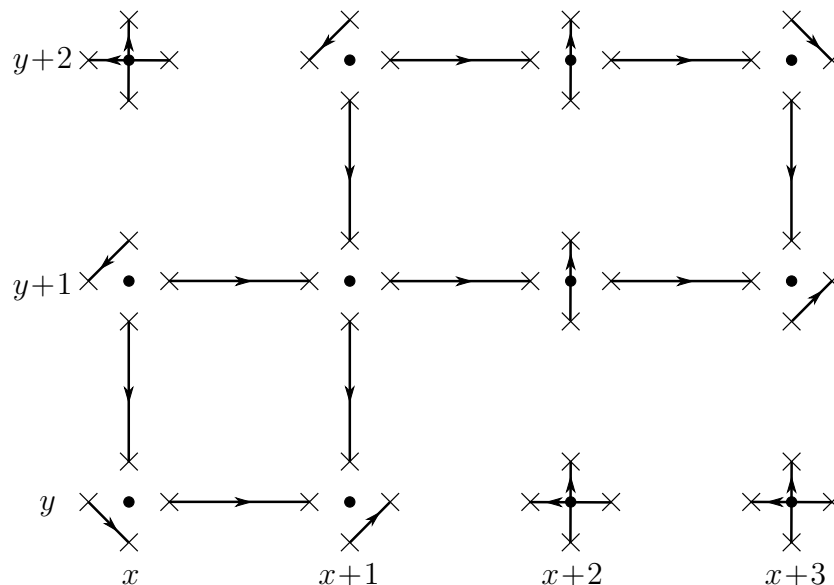


Abbildung A.2.: Beispiel 2.

Das Integral über die freien Gitterplätze liefern nach (3.37h) keinen Beitrag. Die übrigen Terme lauten dann

$$\begin{aligned}
& \int \mathcal{D}\eta \exp \left\{ t \left(\eta_{x,y}^{\rightarrow} \eta_{x+1,y}^{\leftarrow} + \eta_{x,y+1}^{\rightarrow} \eta_{x+1,y+1}^{\leftarrow} + \eta_{x+1,y+1}^{\rightarrow} \eta_{x+2,y+1}^{\leftarrow} + \eta_{x+2,y+1}^{\rightarrow} \eta_{x+3,y+1}^{\leftarrow} \right. \right. \\
& \quad + \eta_{x+1,y+2}^{\rightarrow} \eta_{x+2,y+2}^{\leftarrow} + \eta_{x+2,y+2}^{\rightarrow} \eta_{x+3,y+2}^{\leftarrow} + \eta_{x,y+1}^{\downarrow} \eta_{x,y}^{\uparrow} + \eta_{x+1,y+1}^{\downarrow} \eta_{x+1,y}^{\uparrow} + \eta_{x+1,y+2}^{\downarrow} \eta_{x+1,y+1}^{\uparrow} \\
& \quad + \eta_{x+3,y+2}^{\downarrow} \eta_{x+3,y+1}^{\uparrow} \left. \right) + \eta_{x,y}^{\leftarrow} \eta_{x,y}^{\downarrow} + \eta_{x+1,y}^{\downarrow} \eta_{x+1,y}^{\rightarrow} + \eta_{x+3,y+1}^{\downarrow} \eta_{x+3,y+1}^{\rightarrow} + \eta_{x,y+1}^{\uparrow} \eta_{x,y+1}^{\leftarrow} \\
& \quad \left. + \eta_{x+1,y+2}^{\uparrow} \eta_{x+1,y+2}^{\leftarrow} + \eta_{x+3,y+2}^{\uparrow} \eta_{x+3,y+2}^{\leftarrow} + \eta_{x+2,y+1}^{\downarrow} \eta_{x+2,y+1}^{\uparrow} + \eta_{x+2,y+2}^{\downarrow} \eta_{x+2,y+2}^{\uparrow} \right\} \\
& = t^{10} \int \mathcal{D}\eta \left(\eta_{x,y}^{\leftarrow} \eta_{x,y}^{\downarrow} \right) \left(\eta_{x,y}^{\rightarrow} \eta_{x+1,y}^{\leftarrow} \right) \left(\eta_{x,y+1}^{\downarrow} \eta_{x,y}^{\uparrow} \right) \left(\eta_{x+1,y}^{\downarrow} \eta_{x+1,y}^{\rightarrow} \right) \left(\eta_{x+1,y+1}^{\downarrow} \eta_{x+1,y}^{\uparrow} \right) \left(\eta_{x,y+1}^{\uparrow} \eta_{x,y+1}^{\leftarrow} \right) \\
& \quad \cdot \left(\eta_{x,y+1}^{\rightarrow} \eta_{x+1,y+1}^{\leftarrow} \right) \left(\eta_{x+1,y+1}^{\rightarrow} \eta_{x+2,y+1}^{\leftarrow} \right) \left(\eta_{x+1,y+2}^{\downarrow} \eta_{x+1,y+1}^{\uparrow} \right) \left(\eta_{x+2,y+1}^{\downarrow} \eta_{x+2,y+1}^{\uparrow} \right) \\
& \quad \cdot \left(\eta_{x+2,y+1}^{\rightarrow} \eta_{x+3,y+1}^{\leftarrow} \right) \left(\eta_{x+3,y+1}^{\downarrow} \eta_{x+3,y+1}^{\rightarrow} \right) \left(\eta_{x+3,y+2}^{\downarrow} \eta_{x+3,y+1}^{\uparrow} \right) \left(\eta_{x+1,y+2}^{\uparrow} \eta_{x+1,y+2}^{\leftarrow} \right) \\
& \quad \cdot \left(\eta_{x+1,y+2}^{\rightarrow} \eta_{x+2,y+2}^{\leftarrow} \right) \left(\eta_{x+2,y+2}^{\downarrow} \eta_{x+2,y+2}^{\uparrow} \right) \left(\eta_{x+2,y+2}^{\rightarrow} \eta_{x+3,y+2}^{\leftarrow} \right) \left(\eta_{x+3,y+2}^{\uparrow} \eta_{x+3,y+2}^{\rightarrow} \right) \left. \right\} \\
& = t^{10} \int \mathcal{D}\eta \left(\eta_{x,y}^{\leftarrow} \eta_{x,y}^{\downarrow} \eta_{x,y}^{\rightarrow} \eta_{x,y}^{\uparrow} \right) \left(\eta_{x+1,y}^{\leftarrow} \eta_{x+1,y}^{\downarrow} \eta_{x+1,y}^{\rightarrow} \eta_{x+1,y}^{\uparrow} \right) \left(-\eta_{x,y+1}^{\downarrow} \eta_{x,y+1}^{\uparrow} \eta_{x,y+1}^{\leftarrow} \eta_{x,y+1}^{\rightarrow} \right) \\
& \quad \cdot \left(\eta_{x+1,y+1}^{\downarrow} \eta_{x+1,y+1}^{\leftarrow} \eta_{x+1,y+1}^{\rightarrow} \eta_{x+1,y+1}^{\uparrow} \right) \left(-\eta_{x+2,y+1}^{\leftarrow} \eta_{x+2,y+1}^{\downarrow} \eta_{x+2,y+1}^{\uparrow} \eta_{x+2,y+1}^{\rightarrow} \right) \\
& \quad \cdot \left(-\eta_{x+3,y+1}^{\leftarrow} \eta_{x+3,y+1}^{\downarrow} \eta_{x+3,y+1}^{\rightarrow} \eta_{x+3,y+1}^{\uparrow} \right) \left(\eta_{x+1,y+2}^{\downarrow} \eta_{x+1,y+2}^{\uparrow} \eta_{x+1,y+2}^{\leftarrow} \eta_{x+1,y+2}^{\rightarrow} \right) \\
& \quad \left(\eta_{x+2,y+2}^{\leftarrow} \eta_{x+2,y+2}^{\downarrow} \eta_{x+2,y+2}^{\uparrow} \eta_{x+2,y+2}^{\rightarrow} \right) \left(\eta_{x+3,y+2}^{\downarrow} \eta_{x+3,y+2}^{\leftarrow} \eta_{x+3,y+2}^{\uparrow} \eta_{x+3,y+2}^{\rightarrow} \right) \left. \right\} \\
& = + t^{10} .
\end{aligned}$$

Es wurde wieder genau wie oben vorgegangen. Im ersten Schritt wurde die Exponentialfunktion mithilfe von $e^\eta = 1 + \eta$ aufgelöst. Nur der Term, in dem alle Graßmann-Variablen vorkommen, überlebt in der Integration. Im zweiten Schritt werden die Variablen so umsortiert, dass alle Integrationen leicht hintereinander durchgeführt werden können.

B. Nebenrechnungen

B.1. Quantenmechanisches Pfadintegral

Dieses Kapitel soll nur eine kurze Zusammenfassung bieten, um die Verbindung der Zustandssumme (3.47) mit dem quantenmechanischen Pfadintegral aufzuzeigen. Für eine genauere Behandlung des Themas siehe z.B. [Mue].

Durch Einfügen der "Einsen" $\langle n|n\rangle$ und $\int dx |x\rangle \langle x|$ lässt sich die kanonische Zustandssumme als

$$Z = \sum_n e^{-\beta E_n} = \int dx \sum_n e^{-\beta E_n} \langle n|x\rangle \langle x|n\rangle = \int dx \langle x| e^{-\beta H} |x\rangle \quad (\text{B.1})$$

schreiben. $\langle x| e^{-\beta H} |x\rangle$ ist ein Spezialfall der QM-Übergangsamplitude, welche in der Pfadintegralsformulierung eine große Rolle spielt. Es gilt

$$\begin{aligned} \langle x| e^{-\beta H} |x\rangle &= \langle x| \exp \left\{ - \left(\frac{\beta}{2} V(Q) + \beta H_0 + \frac{\beta}{2} V(Q) \right) \right\} |x\rangle \\ &\stackrel{\Delta\beta=\beta/N}{=} \lim_{N \rightarrow \infty} \langle x| \left(e^{-\frac{\Delta\beta}{2} V(Q)} e^{-\Delta\beta H_0} e^{-\frac{\Delta\beta}{2} V(Q)} \right)^N |x\rangle \\ &=: \lim_{N \rightarrow \infty} \langle x| E^N |x\rangle \\ &= \lim_{N \rightarrow \infty} \int dx_1 \cdots dx_{N-1} \langle x| E |x_1\rangle \cdots \langle x_{N-1}| E |x\rangle . \end{aligned} \quad (\text{B.2})$$

Mit

$$\begin{aligned}
\langle x_i | e^{-\Delta\beta H_0} | x_j \rangle &= \int dp \langle x_i | p \rangle e^{-\Delta\beta \frac{p^2}{2m}} \langle p | x_j \rangle \\
&= \int \frac{dp}{2\pi} e^{ip(x_i - x_j)} e^{-\Delta\beta \frac{p^2}{2m}} \\
&= \sqrt{\frac{m}{2\pi\Delta\beta}} e^{\frac{m}{2\Delta\beta}(x_i - x_j)^2}
\end{aligned} \tag{B.3}$$

und

$$\begin{aligned}
\langle x_i | E | x_j \rangle &= \langle x_i | e^{-\frac{\Delta\beta}{2}V(Q)} e^{-\Delta\beta H_0} e^{-\frac{\Delta\beta}{2}V(Q)} | x_j \rangle \\
&= e^{-\frac{\Delta\beta}{2}V(x_i)} \langle x_i | e^{-\Delta\beta H_0} | x_j \rangle e^{-\frac{\Delta\beta}{2}V(x_j)}
\end{aligned} \tag{B.4}$$

lässt sich die Übergangsamplitude zu

$$\begin{aligned}
\langle x | e^{-\beta H} | x \rangle &= \lim_{N \rightarrow \infty} \left(\frac{m}{2\pi\Delta\beta} \right)^{\frac{N}{2}} \int dx_1 \cdots dx_{N-1} \\
&\quad \exp \left\{ \frac{m}{2\Delta\beta} [(x - x_1)^2 + \cdots + (x_{N-1} - x)^2] \right. \\
&\quad \left. - \Delta\beta [V(x) + V(x_1) + \cdots + V(x_{N-1})] \right\}
\end{aligned} \tag{B.5}$$

umformen, was im Limes von $N \rightarrow \infty$ bzw. $\Delta\beta \rightarrow 0$

$$\langle x | e^{-\beta H} | x \rangle = \int Dx \exp \left\{ \int_0^\beta d\beta' \left[\frac{m}{2} \dot{x}(\beta')^2 - V(x(\beta')) \right] \right\} \tag{B.6}$$

ergibt. Zusammen mit (B.1) lässt sich die Zustandssumme Z also

$$Z = \int dx \int Dx \exp \left\{ \int_0^\beta d\beta' \left[\frac{m}{2} \dot{x}(\beta')^2 - V(x(\beta')) \right] \right\} \tag{B.7}$$

schreiben. Der Exponent nimmt die Form einer Wirkung S ein.

B.2. Vorfaktoren a

Zur Bestimmung der Koeffizienten a muss (3.43) geeignet umgestellt werden. Gleichungen (3.37) und (3.41) werden zu Auflösung der Terme benutzt. Zuerst wird nach den einzelnen Koeffizienten sortiert. Die nächsten Schritte sind das Zusammenführen von Termen gleicher Potenz unter ständiger Ausnutzung von (3.40) und der Tatsache, dass

$$(-1)^{2n} = 1.$$

$$\begin{aligned}
1 &= (-1)^l a_v^{k_{\text{up}}} (-a_v)^{k_{\text{down}}} a_h^{k_{\text{right}}} (-a_h)^{k_{\text{left}}} \prod_{i,j} I(\eta^{(i)} \eta^{(j)})^{n_{i,j}} \\
&= (-1)^l a_v^{k_{\text{up}}} (-a_v)^{k_{\text{down}}} a_h^{k_{\text{right}}} (-a_h)^{k_{\text{left}}} (a_{\rightarrow\leftarrow})^{n_{\uparrow\downarrow}} (-a_{\rightarrow\leftarrow})^{n_{\downarrow\uparrow}} (a_{\downarrow\leftarrow})^{n_{\rightarrow\uparrow}} (-a_{\downarrow\leftarrow})^{n_{\uparrow\rightarrow}} \\
&\quad \cdot (a_{\downarrow\rightarrow})^{n_{\uparrow\leftarrow}} (-a_{\downarrow\rightarrow})^{n_{\leftarrow\uparrow}} (a_{\uparrow\leftarrow})^{n_{\downarrow\rightarrow}} (-a_{\uparrow\leftarrow})^{n_{\rightarrow\downarrow}} (a_{\uparrow\rightarrow})^{n_{\leftarrow\downarrow}} (-a_{\uparrow\rightarrow})^{n_{\downarrow\leftarrow}} (a_{\uparrow\downarrow})^{n_{\rightarrow\leftarrow}} (-a_{\uparrow\downarrow})^{n_{\leftarrow\rightarrow}} \\
&= a_v^{n_{\downarrow\uparrow}+n_{\downarrow\rightarrow}+n_{\downarrow\leftarrow}} (-a_v)^{n_{\uparrow\downarrow}+n_{\uparrow\rightarrow}+n_{\uparrow\leftarrow}} a_h^{n_{\leftarrow\rightarrow}+n_{\leftarrow\uparrow}+n_{\leftarrow\downarrow}} (-a_h)^{n_{\rightarrow\leftarrow}+n_{\rightarrow\uparrow}+n_{\rightarrow\downarrow}} \\
&\quad \cdot (-a_{\rightarrow\leftarrow})^{n_{\uparrow\downarrow}+n_{\downarrow\uparrow}} (-a_{\downarrow\leftarrow})^{n_{\rightarrow\uparrow}+n_{\uparrow\rightarrow}} (-a_{\downarrow\rightarrow})^{n_{\uparrow\leftarrow}+n_{\leftarrow\uparrow}} (-a_{\uparrow\leftarrow})^{n_{\downarrow\rightarrow}+n_{\rightarrow\downarrow}} \\
&\quad \cdot (-a_{\uparrow\rightarrow})^{n_{\downarrow\leftarrow}+n_{\leftarrow\downarrow}} (-a_{\uparrow\downarrow})^{n_{\rightarrow\leftarrow}+n_{\leftarrow\rightarrow}} (-1)^{l+n_{\uparrow\downarrow}+n_{\uparrow\rightarrow}+n_{\uparrow\leftarrow}+n_{\downarrow\rightarrow}+n_{\downarrow\leftarrow}+n_{\rightarrow\leftarrow}} \\
&= a_v^{n_{\uparrow\downarrow}+n_{\downarrow\uparrow}+n_{\downarrow\rightarrow}+n_{\downarrow\leftarrow}+n_{\uparrow\leftarrow}+n_{\uparrow\rightarrow}+n_{\uparrow\downarrow}} a_h^{n_{\rightarrow\leftarrow}+n_{\leftarrow\rightarrow}+n_{\leftarrow\uparrow}+n_{\leftarrow\downarrow}+n_{\rightarrow\uparrow}+n_{\rightarrow\downarrow}+n_{\rightarrow\leftarrow}} \\
&\quad \cdot (-a_{\rightarrow\leftarrow})^{n_{\uparrow\downarrow}+n_{\downarrow\uparrow}} (-a_{\uparrow\downarrow})^{n_{\rightarrow\leftarrow}+n_{\leftarrow\rightarrow}} (-a_{\downarrow\leftarrow})^{n_{\rightarrow\uparrow}+n_{\uparrow\rightarrow}} (-a_{\downarrow\rightarrow})^{n_{\uparrow\leftarrow}+n_{\leftarrow\uparrow}} \\
&\quad \cdot (-a_{\uparrow\leftarrow})^{n_{\downarrow\rightarrow}+n_{\rightarrow\downarrow}} (-a_{\uparrow\rightarrow})^{n_{\downarrow\leftarrow}+n_{\leftarrow\downarrow}} \\
&\quad \cdot (-1)^{l+n_{\uparrow\downarrow}+n_{\uparrow\rightarrow}+n_{\uparrow\leftarrow}+n_{\downarrow\rightarrow}+n_{\downarrow\leftarrow}+n_{\rightarrow\leftarrow}+n_{\rightarrow\uparrow}+n_{\rightarrow\downarrow}+n_{\rightarrow\leftarrow}+n_{\rightarrow\uparrow}+n_{\rightarrow\downarrow}} \\
&= a_v^{n_{\uparrow\rightarrow}+n_{\downarrow\rightarrow}+n_{\uparrow\leftarrow}+n_{\downarrow\leftarrow}} a_h^{n_{\rightarrow\uparrow}+n_{\leftarrow\uparrow}+n_{\downarrow\rightarrow}+n_{\leftarrow\downarrow}} (-a_v a_{\rightarrow\leftarrow})^{n_{\uparrow\downarrow}+n_{\downarrow\uparrow}} (-a_h a_{\uparrow\downarrow})^{n_{\rightarrow\leftarrow}+n_{\leftarrow\rightarrow}} \\
&\quad \cdot (-a_{\downarrow\leftarrow})^{(l+n_{\leftarrow\downarrow})+n_{\uparrow\rightarrow}} (-a_{\downarrow\rightarrow})^{n_{\uparrow\leftarrow}+(l+n_{\downarrow\rightarrow})} (-a_{\uparrow\leftarrow})^{n_{\downarrow\rightarrow}+(l+n_{\uparrow\leftarrow})} (-a_{\uparrow\rightarrow})^{(l+n_{\rightarrow\uparrow})+n_{\leftarrow\downarrow}} \\
&\quad \cdot (-1)^{l+n_{\downarrow\rightarrow}+n_{\leftarrow\downarrow}+n_{\uparrow\rightarrow}+n_{\rightarrow\downarrow}} \\
&= a_v^{(l+n_{\leftarrow\downarrow})+n_{\downarrow\rightarrow}+n_{\uparrow\leftarrow}+(l+n_{\rightarrow\uparrow})} a_h^{n_{\rightarrow\uparrow}+(l+n_{\downarrow\rightarrow})+(l+n_{\uparrow\leftarrow})+n_{\leftarrow\downarrow}} (-a_v a_{\rightarrow\leftarrow})^{n_{\uparrow\downarrow}+n_{\downarrow\uparrow}} \\
&\quad \cdot (-a_h a_{\uparrow\downarrow})^{n_{\rightarrow\leftarrow}+n_{\leftarrow\rightarrow}} (a_{\uparrow\rightarrow} a_{\downarrow\leftarrow})^{l+n_{\leftarrow\downarrow}+n_{\uparrow\rightarrow}} (a_{\uparrow\leftarrow} a_{\downarrow\rightarrow})^{n_{\uparrow\leftarrow}+l+n_{\downarrow\rightarrow}} \\
&\quad \cdot (-1)^{l+n_{\downarrow\rightarrow}+n_{\leftarrow\downarrow}+(l+n_{\leftarrow\downarrow})+(l+n_{\uparrow\leftarrow})} \\
&= (-a_v a_{\rightarrow\leftarrow})^{n_{\uparrow\downarrow}+n_{\downarrow\uparrow}} (-a_h a_{\uparrow\downarrow})^{n_{\rightarrow\leftarrow}+n_{\leftarrow\rightarrow}} (a_v a_h a_{\uparrow\rightarrow} a_{\downarrow\leftarrow})^{l+n_{\leftarrow\downarrow}+n_{\uparrow\rightarrow}} \\
&\quad \cdot (a_v a_h a_{\uparrow\leftarrow} a_{\downarrow\rightarrow})^{n_{\uparrow\leftarrow}+l+n_{\downarrow\rightarrow}} \cdot (-1)^{l+n_{\downarrow\rightarrow}+n_{\uparrow\leftarrow}} \\
&= (-a_v a_{\rightarrow\leftarrow})^{n_{\uparrow\downarrow}+n_{\downarrow\uparrow}} (-a_h a_{\uparrow\downarrow})^{n_{\rightarrow\leftarrow}+n_{\leftarrow\rightarrow}} (a_v a_h a_{\uparrow\rightarrow} a_{\downarrow\leftarrow})^{l+n_{\leftarrow\downarrow}+n_{\uparrow\rightarrow}} \\
&\quad \cdot (-a_v a_h a_{\uparrow\leftarrow} a_{\downarrow\rightarrow})^{n_{\uparrow\leftarrow}+l+n_{\downarrow\rightarrow}} \tag{B.8}
\end{aligned}$$

B.3. Fouriertransformation

Für die kontinuierliche Fouriertransformation

$$a(x) = \int \frac{dk}{2\pi} A(k) e^{ikx} \quad \text{und} \quad A(k) = \int dx a(x) e^{-ikx} \tag{B.9}$$

folgt direkt mit

$$A(k) = 2\pi\delta(k - k') \quad (\text{B.10})$$

aus

$$a(x) = \int \frac{dk}{2\pi} A(k) e^{ikx} = \int dk \delta(k - k') e^{ikx} = e^{ik'x}, \quad (\text{B.11})$$

die wichtige und nützliche Beziehung

$$\int dx e^{-ikx} e^{-ik'x} = \int dx e^{i(k'-k)x} = 2\pi\delta(k - k'). \quad (\text{B.12})$$

Eine ähnliche Form besitzt auch die nach (3.49) diskrete Fouriertransformierte

$$A_n = \sum_{n'=-N}^N \exp\left\{\frac{2\pi i}{2N+1}(n - n')x\right\}. \quad (\text{B.13})$$

Für $n = n'$ ist die Summe einfach

$$A_n = \sum_{n'=-N}^N e^0 = 2N + 1. \quad (\text{B.14})$$

Für $n \neq n'$ zeigt sich, dass die geometrische Reihe dagegen zu

$$\begin{aligned} A_n &= \sum_n \exp\left\{\frac{2\pi i}{2N+1}(n - n')x\right\} \\ &= \exp\left\{-\frac{2\pi i}{2N+1}n'x\right\} \sum_n \left(\exp\left\{\frac{2\pi i}{2N+1}x\right\}\right)^n \\ &= e^{-\frac{2\pi i n' x}{2N+1}} \frac{e^{-\frac{2\pi i N x}{2N+1}}}{e^{\frac{2\pi i x}{2N+1}} - 1} \underbrace{(1 - e^{2\pi i x})}_{=0} \\ &= 0 \end{aligned} \quad (\text{B.15})$$

verschwindet und somit

$$\sum_{n'=-N}^N \exp\left\{\frac{2\pi i}{2N+1}(n - n')x\right\} = (2N + 1) \delta_{n,n'} \quad (\text{B.16})$$

gilt.

Literaturverzeichnis

- [Isi] E. Ising, Z. Phys. 31 (1925) 253-258 1
- [Sam1] S. Samuel, J. Math. Phys. 21 (1980) 2806-2814 8, 16, 22
- [Sam2] S. Samuel, J. Math. Phys. 21 (1980) 2815-2819
- [Ons] L. Onsager, Phys. Rev. 65 (1944) 117 1, 8, 25, 26, 31
- [Itz] C. Itzykson, Nuclear Physics B210 (1982) 448-476
- [Mue] G. Münster, Quantentheorie (2010) 44
- [Nol4] W. Nolting, Grundkurs: Theoretische Physik 4 (1991) 6
- [Nol6] W. Nolting, Grundkurs: Theoretische Physik 6 (1994) 1, 5, 6, 27
- [NolM1] W. Nolting, Quantentheorie des Magnetismus 1 (1986) 237-246 3
- [NolM2] W. Nolting, Quantentheorie des Magnetismus 2 (1986) 26-36 5
- [Weg] F. Wegner, Graßmann-Variable, Ausarbeitung unveröffentlicher Aufzeichnungen (1998) 11, 12, 15, 20
- [Sre] M. Srednicki, Quantum Field Theory (2007) 275-281 11
- [Wil] K. G. Wilson, Rev. Mod. Phys. 47 (1975) 797-804 27, 28
- [MarKad] H. J. Maris, L. P. Kadanoff, Am. J. Phys. 46 (1978) 652 27
- [Kad] L. P. Kadanoff, Statistical Physics (2000) 252-268, 291-298 27, 35, 37
- [Wip] A. Wipf, Quantenfeldtheorie II (2009) 222-228 35, 36
- [Dem] W. Demtröder, Experimentalphysik 2 (2006) 110-114 10
- [Blu] S. Bludell, Magnetism in Condensed Matter (2003) 127-128 10
- Latex-Vorlage von A. Sawatzky (Aufgerufen Sept. 2014):
[http://wwwmath.uni-muenster.de/num/Vorlesungen/
AnleitungZumWissenschaftlichenArbeiten_SS12/](http://wwwmath.uni-muenster.de/num/Vorlesungen/AnleitungZumWissenschaftlichenArbeiten_SS12/)