

Energieaufspaltung im zweidimensionalen Ising-Modell

als Diplomarbeit vorgelegt von
Björn Vogt

Januar 2003

Institut für Theoretische Physik
Westfälische Wilhelms-Universität Münster

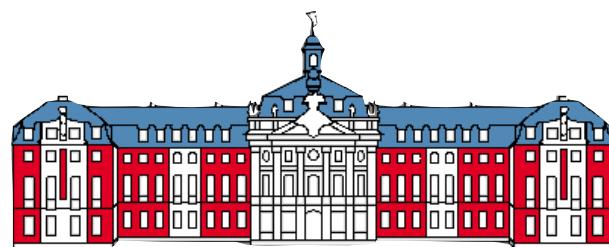


Energieaufspaltung im zweidimensionalen Ising-Modell

als Diplomarbeit vorgelegt von
Björn Vogt

Januar 2003

Institut für Theoretische Physik
Westfälische Wilhelms-Universität Münster



Diese korrigierte Version unterscheidet sich lediglich geringfügig von derjenigen, welche dem Prüfungssekretariat vorgelegt wurde.
Die Verbesserungen sind in erster Linie von orthographischer und stilistischer Natur. Inhalte und Ergebnisse werden von diesen daher in keiner Weise tangiert.

Münster, im April 2003

„Nicht so viel Interessantes...außer Onsagers exakter Lösung des zweidimensionalen Ising-Modells.“

Dies antwortete Wolfgang Pauli auf die Anfrage von H.B.G. Casimir, der aufgrund des Zweiten Weltkriegs von den aktuellen Entwicklungen der Theoretischen Physik abgeschnitten war, was sich auf diesem Gebiet ereignet habe [1, 2].

Inhaltsverzeichnis

1 Einleitung	1
1.1 Zum Thema	1
1.2 Überblick über diese Arbeit	4
1.3 Historisches	8
2 Onsager-Lösung des zweidimensionalen Ising-Modells nach Kaufman	13
2.1 Grundlagen	13
2.2 Diagonalisierung der Transfermatrix	18
2.2.1 Aufteilung von \mathcal{P} in V_2 und V'_1	18
2.2.2 Darstellung von V_2 und V'_1 als direkte Produkte	18
2.2.3 Drehungen und deren Spindarstellungen	20
2.2.4 Formulierung von V_1 und V_2 als Spindarstellungen	21
2.2.5 Aufspaltung von V in V^+ und V^- durch Randbedingungen	22
2.2.6 Diagonalisierung von U	23
2.2.7 Die Symmetrie U und Beiträge zur Zustandssumme	23
2.2.8 Die Eigenwerte von V^+ und V^-	25
2.2.9 Die Eigenwerte von V	27
2.2.10 Diskussion des Spektrums	29
2.3 Die Zustandssumme	33
2.4 Thermodynamischer Limes und Phasenübergang	34
3 Einbau antiperiodischer Randbedingungen in zwei verschiedenen Darstellungen	35
3.1 Darstellung I: In t -Richtung propagierende Transfermatrix	35
3.1.1 Antiperiodische RB in x -Richtung	36
3.1.2 Antiperiodische RB in t -Richtung	38
3.1.3 Sektoren	39
3.2 Alternative Darstellung II: In x -Richtung propagierende Transfermatrix	42
3.3 Zusammenfassung und Vergleich der Methoden	45
4 Fermionische Darstellung	47
4.1 Die Lösung des zweidimensionalen Ising-Modells mittels fermionischer Operatoren	47
4.1.1 Alternative Formulierung der Transfermatrix	47

INHALTSVERZEICHNIS

4.1.2	Transformation auf reine Fermion-Operatoren	50
4.1.3	Aufteilung von V in V^+ und V^-	53
4.1.4	Randbedingungen für Fermionoperatoren	54
4.1.5	Ergebnis nach Diagonalisierung	56
4.1.6	Erklärung des Energiespektrums	59
4.2	Zusammenfassung: Vergleich der fermionischen Darstellung mit der Onsager-Kaufman-Lösung	63
4.3	Aufstellung der Sektor-Zustandssummen $Z_{\tau_x \tau_t}$	64
4.4	Fermionische Zustandssummen und Sektoren	66
4.4.1	Fermionische Zustandssummen in Darstellung I	66
4.4.2	Fermionische Zustandssummen in Darstellung II	69
4.5	Äquivalenzbeweis von Darstellung I und II	71
4.5.1	Doppelproduktdarstellung der $Z_{\epsilon_x \epsilon_t}^F$ (Darstellung I)	71
4.5.2	Doppelproduktdarstellung der $\tilde{Z}_{\epsilon_x \epsilon_t}^F$ (Darstellung II)	72
5	Berechnung der Energieaufspaltung	74
5.1	Aufstellung und Eigenschaften der Energieaufspaltung	74
5.2	Darstellung durch Fourierkoeffizienten	78
5.3	Berechnung des Integrals c_L	80
5.3.1	Partielle Integration	80
5.3.2	Auffinden der Verzweigungspunkte und Schlitze von $h(z)$	80
5.3.3	Integration entlang des Schlitzes	81
5.3.4	Berechnung der Diskontinuität	84
5.3.5	Sattelpunktsentwicklung	85
5.3.6	Ergebnis für die Energieaufspaltung ΔE	87
5.3.7	Ergebnis für die Grenzflächenspannung σ	87
5.3.8	Alternative: Rechnung ohne partielle Integration	88
5.3.9	Alternative: Wurzelnäherung für $ \varepsilon(x) $	90
6	Alternativer Zugang zur Energieaufspaltung	94
6.1	Die Idee	94
6.2	Charakterisierung über Fermion-Anregungen	97
6.2.1	Notation	97
6.2.2	Die Grundgrößen Y_α^δ	99
6.2.3	Fermionische Zustandssummen $Z_{\epsilon_x \epsilon_t}^F$	103
6.2.4	Spin-Zustandssummen $Z_{\tau_x \tau_t}$	105
6.3	Aufstellung der Energieaufspaltung $\widehat{\Delta E}$ über das Verhältnis von Z_- und Z_+	110
6.3.1	Verhältnis der Zustandssummen	110
6.3.2	Bezug zu einer Energieaufspaltung	111
6.3.3	Energieaufspaltung: Integral über Fermion-Energien	113
6.4	Berechnung des Integrals $\widehat{\Delta E}$	115
6.4.1	Vorbereitungen	115
6.4.2	Sattelpunktsapproximation	116
6.4.3	Ergebnis für die Energieaufspaltung $\widehat{\Delta E}$	119
6.4.4	Überprüfung mit Wurzelnäherung	120
6.5	Analytische Beziehungen zu $\Delta E = -L c_L$	122

INHALTSVERZEICHNIS

7 Resümee	126
A Grenzflächen im eindimensionalen Ising-Modell	130
A.1 Beschreibung des eindimensionalen Ising-Modells	130
A.2 Antiperiodische RB durch Spinumkehr	133
A.3 Grenzfläche bei antiferromagnetischer Kopplung	134
A.4 Fermionische Beschreibung des 1-D-Modells	137
A.5 Übergang zu zwei Dimensionen	140
B Identitäten am Einheitskreis	145
B.1 Beweis der Identität (5.15)	145
B.2 Weitere Relationen	147
B.3 Beweis von (4.102) und (4.103)	148
C Verzweigungspunkte und Schlitze	151
D Parametrisierungsschema	154
E Gammafunktionen	157
Literaturverzeichnis	158

Kapitel 1

Einleitung

1.1 Zum Thema

Aus der Quantenfeldtheorie und der Statistischen Physik sind Systeme bekannt, die spontane Symmetriebrechung zeigen. Als veranschaulichendes Beispiel dieses Phänomens aus der Alltagswelt diene ein Holzbalken, der senkrecht auf dem Wasser schwimmend mit der Hand festgehalten werde. Durch Loslassen gerät der Holzbalken (eine geeignete Präparation vorausgesetzt) in eine instabile Lage und wird in eine beliebige Richtung wekippen, die ihm eine stabile Lage verspricht. Dadurch, daß er letztlich in nur eine der ihm dargebotenen Richtungen wekippt, wird die Symmetrie spontan gebrochen.

Liegt eine solche spontane Symmetriebrechung vor, können verschiedene Phasen, die das System annehmen kann, einzeln existieren oder auch nebeneinander koexistieren, wobei sie durch eine Grenzfläche voneinander getrennt werden. Man denke sich hierzu einen Ferromagneten, in welchem unterhalb der Curie-Temperatur \tilde{T}_C verschiedene räumliche Bereiche vorliegen, die ein entgegengesetztes Vorzeichen in der Magnetisierung aufweisen und als Weißsche Bezirke experimentell beobachtbar sind. Ebenso gut mag man sich ein Gemisch zweier Flüssigkeiten vorstellen, welches unterhalb einer kritischen Temperatur \tilde{T}_C in zwei Phasen separiert, in denen jeweils eine Flüssigkeitssorte überwiegt (z.B. Cyclohexan und Anilin, $\tilde{T}_C = 30,9^\circ\text{C}$ [3]).

Als prominentes Beispiel aus dem Bereich der Feldtheorie sei hierzu die ϕ^4 -Theorie in der Phase gebrochener Symmetrie genannt. Auf dem Gebiet der Elementarteilchenphysik steuert diese über den Higgs-Mechanismus einen wichtigen Bestandteil zum heutigen Standardmodell bei; sie ist aber auch weit verbreitet zur Beschreibung von Phasenübergängen im Rahmen einer statistischen Feldtheorie.

Seitens einer rein statistischen Beschreibung ist spontane Symmetriebrechung aber auch im *Ising-Modell* anzutreffen, welches sich unter der Annahme interagierender nächstbenachbarter Spins, die nur zwei diskrete Zustände $s = \pm 1$ („up“ und „down“) annehmen können (Abb. 1.1), zu einem Standardmodell in der Statistischen Physik entwickelt hat. Das Ising-Modell nimmt bis heute eine Ausnahmestellung ein aufgrund seiner analytischen Lösbarkeit in zwei Dimensionen bei gleichzeitiger Beinhaltung eines Phasenübergangs. Wie bereits Ising

selber 1925 in [4] resümierte, tritt dieser in einer Dimension nicht auf; den zweidimensionalen Fall konnte er allerdings noch nicht lösen. Die exakte Lösung in zwei Dimensionen blieb Onsager [9] 1944 vorbehalten, nachdem sich in den vorangehenden Jahren Hinweise auf einen Phasenübergang gehäuft hatten [5, 6, 7, 8]. Da bis jetzt noch keine analytische Lösung in drei und höheren Dimensionen vorliegt, gilt gerade dem zweidimensionalen Ising-Modell ein besonderes Interesse, mit dem sich auch die vorliegende Arbeit beschäftigt. Einem historischen Rückblick auf die Geschichte des Ising-Modells ist der Abschnitt 1.3 gewidmet.

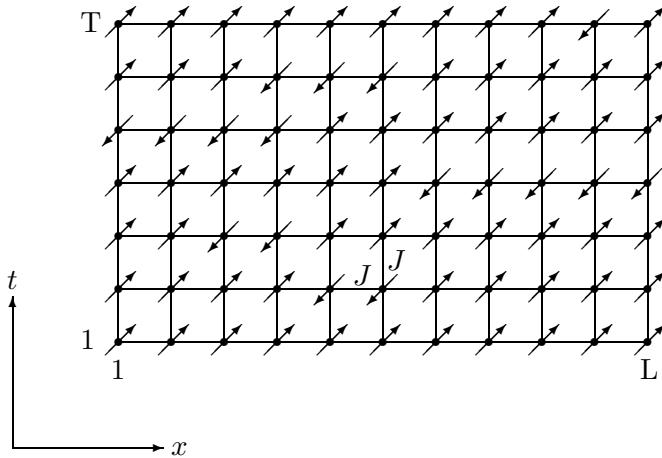


Abbildung 1.1: Zweidimensionales Ising-Modell ($L \times T$): Die auf den Gitterpunkten ansässigen Spins verfügen über zwei Einstellmöglichkeiten, wobei über eine Kopplung J Wechselwirkungen zwischen benachbarten Spins bestehen

Die spontane Symmetriebrechung macht sich nun folgendermaßen im Ising-Modell bemerkbar [10]:

Im unendlichen Volumen ($L, T \rightarrow \infty$) und unterhalb der kritischen Temperatur existieren zwei energetisch entartete Grundzustände $|+\rangle$ und $|-\rangle$, die einen nichtverschwindenden Spin-Erwartungswert $\langle s \rangle = \pm \mu$ mit $\mu > 0$ aufweisen und einer größtmöglichen Magnetisierung in beiden Vorzeichen Rechnung tragen:

$$\langle + | s | + \rangle = +\mu, \quad \langle - | s | - \rangle = -\mu. \quad (1.1)$$

Die Symmetrie $s \rightarrow -s$ ist dadurch spontan gebrochen. Im endlichen Volumen findet hingegen wohlbekanntermaßen keine spontane Symmetriebrechung statt [11]: Infolge von Tunnelprozessen (Umklapprozessen) wird die Entartung aufgehoben und es existiert vielmehr ein einzelner und eindeutiger Grundzustand $|0+\rangle$, in welchem der Erwartungswert $\langle s \rangle = 0$ verschwindet. Die Energie dieses unter der Transformation $s \rightarrow -s$ symmetrischen Grundzustands $|0+\rangle$ liegt nun gerade um die Energieaufspaltung ΔE tiefer als die des antisymmetrischen ersten angeregten Zustands $|0-\rangle$.

1.1. Zum Thema

Diese Zustände lassen sich als folgende Überlagerungen darstellen [10]

$$|0+\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|+\rangle + |-\rangle), \quad |0-\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|+\rangle - |-\rangle), \quad (1.2)$$

wobei dann $|+\rangle$ und $|-\rangle$ diejenigen Zustände repräsentieren, die im Limes unendlicher Systemgröße gegen die entarteten Vakua konvergieren. In diesem Limes finden die mit wachsendem Volumen rasch abnehmenden Tunnelprozesse nicht mehr statt.

Die als Lücke im Spektrum auftretende Energieaufspaltung

$$\Delta E = E_{0-} - E_{0+} \quad (1.3)$$

offenbart sich somit als charakteristische Größe, die es gestattet abzulesen, ob eine spontane Symmetriebrechung vorliegt ($\Delta E = 0$) oder nicht ($\Delta E > 0$), in dem Sinne, daß sie angibt, wann eine Entartung der beiden energetisch niedrigsten Zustände eintritt.

Diese vollzieht sich gemäß obigen Überlegungen offensichtlich im Limes unendlicher Systemgröße $\lim_{L,T \rightarrow \infty} \Delta E = 0$, wobei die Frage, wie dieser Limes vonstatten geht, freilich noch unbeantwortet bleibt. Im Rahmen der vorliegenden Arbeit wird dieses Verhalten der Energieaufspaltung beim Übergang vom endlichen zum unendlichen System näher untersucht. Insbesondere wird ein expliziter Ausdruck gesucht, der über die Angabe des Limes $\Delta E \rightarrow 0$ hinausgeht: Vielmehr soll sich explizit ablesen lassen, wie die Energieaufspaltung kontinuierlich mit zunehmender Anzahl an Freiheitsgraden gegen Null geht.

Diese Zusammenhänge sind übrigens ebenfalls in der eingangs erwähnten ϕ^4 -Theorie wiederzufinden [12], die einen allgemeineren Feldbegriff ϕ verwendet, der aber jederzeit mit dem lokalen Ordnungsparameter wie der spontanen Magnetisierung oder der Konzentrationsdifferenz zweier Flüssigkeiten inhaltlich gefüllt werden kann. Diese Analogie begründet sich dahingehend, daß die ϕ^4 -Theorie im Limes einer unendlich starken bloßen Selbstkopplung das Ising-Modell beinhaltet [13]. Die Analogie zwischen diesen Modellen äußert sich auch in Hinblick auf die Universalitätshypothese [14], nach welcher die Vielfalt physikalischer Systeme im kritischen Bereich in eine relativ kleine Anzahl an Universalitätsklassen zerfällt, innerhalb derer sich universelle Eigenschaften gleichen. Wie auch so manch reales System, beispielsweise das oben beschriebene Flüssigkeitsgemisch, ist die feldbeschreibende ϕ^4 -Theorie in derselben Universalitätsklasse [10, 12] wie das Ising-Modell anzusehen, welches eine statistische Beschreibung auf mikroskopischer Ebene vornimmt.

Diese statistische Beschreibung des Ising-Modells aus den grundlegenden Modellannahmen heraus zu entwickeln und dabei die oben angedeuteten Zusammenhänge aufzufinden wird den Verlauf dieser Arbeit prägen.

Nachfolgend wird ein Überblick über die in dieser Arbeit abgehandelten Thematiken gegeben, welcher ausführlich konzipiert ist und somit bei der Lektüre als Leitfaden dienen kann.

1.2 Überblick über diese Arbeit

Die Grundlage zur analytischen Behandlung des zweidimensionalen Ising-Modells stellt die Onsager-Lösung [9] dar, die in Kapitel 2 vorgestellt wird, allerdings in der eleganten Formulierung von Kaufman [15], die über Spindarstellungen von Drehungen auf direktere Weise zu denselben Ergebnissen gelangt, und welche im Folgenden als Onsager-Kaufman-Lösung bezeichnet sein soll. Das Herzstück dieser algebraischen Herangehensweise stellt der Transfermatrixformalismus dar, welcher es gestattet, die Lösung des Modells auf ein Eigenwertproblem zu reduzieren: Die Zustandssumme als zentrale Größe schreibt sich (bis auf eine wohldefinierte Konstante) in diesem Formalismus als Spur über die T -fache Potenz eben der Transfermatrix V

$$Z' = \text{Sp}(V^T), \quad (1.4)$$

die es somit zu diagonalisieren gilt. Dahinter verbirgt sich der kettengliedweise Transfer entlang einer Reihe, die aus T physikalischen Elementen besteht; angewandt auf das Ising-Gitter in Abb. 1.1 bedeutet dies, daß die Transfermatrix auf einer Zeile dieses Gitters definiert wird und anschließend in T Schritten zeilenweise durch das gesamte Gitter wandert, wodurch sämtliche Anordnungsconfigurationen berücksichtigt werden und woraus sich schließlich die Zustandssumme ergibt.

Es erfolgt zunächst eine ausführliche Diagonalisierung für periodische Randbedingungen. Diese bewirken eine Aufteilung der Zustandssumme

$$Z'_{++} = \text{Sp} \left[\frac{1}{2} (1 + U) (V^+)^T \right] + \text{Sp} \left[\frac{1}{2} (1 - U) (V^-)^T \right] \quad (1.5)$$

symmetrischer Anteil
antisymmetrischer Anteil

in einen symmetrischen und einen antisymmetrischen Anteil, welche jeweils über einen Projektor $\frac{1}{2}(1 \pm U)$ angewählt werden. Die Symmetrie U hat hierbei die physikalische Bedeutung einer Spinumkehr $s \rightarrow -s$ in einer gesamten Zeile des Ising-Gitters.

Die Diskussion der auch graphisch dargestellten Eigenwerte wird ergeben, daß die Zustandssumme durch zwei größte Eigenwerte λ_{0+} und λ_{0-} dominiert wird. Übereinstimmend mit dem Frobenius-Perron-Theorem [11] wird im endlichen Gitter ($L < \infty$) der aus dem symmetrischen Anteil stammende Eigenwert λ_{0+} stets etwas größer sein. In einem Gitter unendlicher Größe ($L \rightarrow \infty$) hingegen tritt eine Entartung $\lim_{L \rightarrow \infty} \lambda_{0+} = \lim_{L \rightarrow \infty} \lambda_{0-}$ ein. Damit liegt genau die eingangs erwähnte Situation vor.

Um die Formulierung auf Energieeigenwerte umzumünzen, bedient man sich des Zusammenhangs [16]

$$V = \exp[-H], \quad (1.6)$$

welcher die Transfermatrix mit dem zugehörigen Hamiltonoperator H aus der Quantentheorie verknüpft. Hierüber kristallisiert sich nun gerade das Vorhan-

densein einer Energieaufspaltung („spectral gap“)

$$\Delta E = E_{0-} - E_{0+} \quad (1.7)$$

$$\text{mit } \lim_{L \rightarrow \infty} \Delta E = 0 \quad (1.8)$$

im zweidimensionalen Ising-Modell heraus. Dessen Berechnung wird den Fortgang dieser Arbeit prägen.

Zunächst werden analytische Rechnungen die Randbedingungen betreffend durchgeführt, die über den Zusammenhang der Energieaufspaltung mit Grenzflächen motiviert werden. Letztere lassen sich in die Lösung des Ising-Modells mittels antiperiodischer Randbedingungen einbauen, welche sich von den periodischen Randbedingungen durch einen zusätzlichen Spineumklapp $s \rightarrow -s$ unterscheiden. Basierend auf der Onsager-Kaufman-Lösung werden in Kapitel 3 Modifikationen in den Randbedingungen und deren Auswirkungen auf die Zustandssummen $Z_{\tau_x \tau_t}$ (Tab. 1.1) untersucht. Über den beteiligten Spineumkehroperator U treten vor allem Veränderungen in den Projektoren $\frac{1}{2}(1 \pm U)$ auf. Entsprechend den vier verschiedenen Zustandssummen ist von vier Sektoren die Rede. Dieses Kalkül wird in zwei Darstellungen durchgeführt, die sich in der Propagationsrichtung der Transfermatrix unterscheiden, aber letztlich gegenseitig bestätigen.

Sektor	$Z_{\tau_x \tau_t}$	τ_x	τ_t	RB in x -Richtung	RB in t -Richtung
++	Z_{++}	+1	+1	periodisch	periodisch
+-	Z_{+-}	+1	-1	periodisch	antiperiodisch
-+	Z_{-+}	-1	+1	antiperiodisch	periodisch
--	Z_{--}	-1	-1	antiperiodisch	antiperiodisch

Tabelle 1.1: Überblick über die Randbedingungen und Sektoren $Z_{\tau_x \tau_t}$

Kapitel 4 stellt mit der fermionischen Darstellung nach Schultz, Mattis und Lieb [17] eine interessante Lösungsalternative des zweidimensionalen Ising-Modells vor, an der sich die bislang beschriebenen Eigenschaften wiederfinden und zugleich veranschaulichen lassen. Ausgehend von der Transfermatrix, wie sie von Onsager und Kaufman über Paulimatrizen formuliert wurde, kann diese nach einer Basistransformation in Erzeugern und Vernichtern ausgedrückt werden. Mittels einer Jordan-Wigner-Transformation [18] gelingt es, verbleibende bosonische Freiheitsgrade zu fermionisieren, so daß sich die Transfermatrix vollständig über Fermionoperatoren darstellen läßt, die den gewohnten Antikommatorrelationen genügen. Nach erfolgter Diagonalisierung ergibt sich ein Hamiltonoperator, der in äußerst einfacher Gestalt freie Fermionen repräsentiert:

$$H = \sum_k \varepsilon_k \left(\xi_k^\dagger \xi_k - \frac{1}{2} \right). \quad (1.9)$$

Hierbei sind ξ_k^\dagger und ξ_k Fermion-Erzeuger und -Vernichter, und ε_k steht für die Energien einzelner Fermionen, während über die möglichen Impulswerte summiert wird. Diese Form des Hamiltonoperators erlaubt nun äußerst prägnante

Veranschaulichungen. Insbesondere kann das Energiespektrum nach (1.9) durch Fermionanregungen aus den jeweiligen Vakua erklärt werden. Einzelheiten werden hierzu in 4.1.6 behandelt.

Da sich in dieser fermionischen Darstellung rein algebraische Ausdrücke aus der Onsager-Kaufman-Lösung veranschaulichen lassen, ergänzen sich diese Lösungsvarianten geradezu gegenseitig in den inhaltlichen Zusammenhängen und eignen sich daher für den gemeinsamen parallelen Gebrauch. Abschnitt 4.2 hält eine tabellarische Übersicht bereit.

Nach der erneuten und bestätigenden Aufstellung der Sektor-Zustandssummen $Z_{\tau_x \tau_t}$ tritt hier noch ein anderer Typ von Zustandssummen zutage, nämlich die fermionischen Zustandssummen Z^F . Diesen liegen nicht die Konfigurationen der Ising-Spins zugrunde, sondern sind auf die Fermionen an sich bezogen. Diese erschließen sich aus grassmannwertigen Integralen [19, 20], können aber unter geschickter Ausnutzung der Grassmann-Algebra direkt aufgestellt werden [21], wobei auch hier wieder vier Sektoren $Z_{\epsilon_x \epsilon_t}^F$ mit unterschiedlichen Randbedingungen auftreten. Diese fermionischen Zustandssummen $Z_{\epsilon_x \epsilon_t}^F$ lassen sich in Beziehung zu den Spin-Zustandssummen $Z_{\tau_x \tau_t}$ setzen und in Doppelprodukte umwandeln, welche eine besondere L - T -Symmetrie aufweisen. Letztere ist sehr aufschlußreich, insbesondere was das Kalkül aus Kapitel 3 betrifft.

Kapitel 5 widmet sich schließlich der expliziten Berechnung der Energieaufspaltung ΔE bei einer großen Anzahl an Freiheitsgraden, sprich großen L .

Unter Rückgriff auf die in Kapitel 3 erzielten Ergebnisse lässt sich zunächst ein Trend absehen, welcher auf eine enge Verknüpfung mit der Grenzflächenspannung σ hinweist [10, 12, 22]. Diese lässt sich über die Differenz der reduzierten Freien Energien in den Sektoren F_{+-} und F_{++} definieren [23, 24]:

$$\sigma = \lim_{T \rightarrow \infty} \lim_{L \rightarrow \infty} \frac{F_{+-} - F_{++} + \ln T}{L}. \quad (1.10)$$

Aus der Betrachtung dominanter Beiträge ergibt sich damit folgende Vorhersage im Falle großer L :

$$\Delta E \sim \exp(-L\sigma). \quad (1.11)$$

Eventuelle Vorfaktoren, die lediglich noch potenzartig von L abhängen, verschwinden in der Limesbildung und lassen sich hieraus noch nicht gewinnen. Genau diese gilt es aber im weiteren Verlauf zu bestimmen.

Ein möglicher Ansatzpunkt, die Energieaufspaltung genauer unter die Lupe zu nehmen, betrifft die Energiedicke $\Delta E = E_{0-} - E_{0+}$ an sich. Schwierigkeiten, die sich aus der getrennten Limitenbildung ($\lim_{L \rightarrow \infty} E_{0+} = \lim_{L \rightarrow \infty} E_{0-}$) ergäben, werden von Privman und Fisher [25] geschickt umgangen, indem sie den Gesamtausdruck nach Fourierkoeffizienten entwickeln, unter denen für große L bereits der niedrigste Koeffizient c_L maßgeblich dominiert:

$$\Delta E = -L \sum_{j=0}^{\infty} c_{(2j+1)L} = -L c_L \left[1 + O(\text{Korrekturen}) \right]. \quad (1.12)$$

1.2. Überblick über diese Arbeit

Der verbleibende Integralausdruck $\Delta E = -L c_L$ wird nach einer Verschiebung des Integrationsweges in die komplexe Ebene auf eine Konturintegration längs eines Schlitzes geführt, welche im Rahmen einer Sattelpunktsentwicklung ausgewertet wird und schließlich den erhofften Ausdruck für die Energieaufspaltung in sich birgt.

Ein alternativer Ansatz zur Berechnung der Energieaufspaltung wird in Kapitel 6 verfolgt. Während diese zuvor grundlegend als Energielücke behandelt wurde, wird nun deren Zusammenhang mit Grenzflächen direkt aufgegriffen, welcher unter Hinzunahme der fermionischen Lösungsmethode tiefgreifend aufgedeckt werden kann. In dieser finden sich Grenzflächen als angeregte Fermionen wieder, wie bereits Beobachtungen bei der Jordan-Wigner-Transformation offenbaren. Im Speziellen wird das Verhältnis der Zustandssummen $\frac{Z_{-+}}{Z_{++}}$ mit und ohne einer Grenzfläche nach Fermion-Beiträgen charakterisiert. Mehrfache Grenzflächen-Anordnungen werden hierbei in den Zustandssummen vernachlässigt, womit eine Einschränkung auf die niedrigsten 0- und 1-Fermion-Anregungen einhergeht.

Für eine große Anzahl an Freiheitsgraden findet sich unter diesen Annahmen für die Energieaufspaltung das folgende Integral über die Konfigurationen der Ein-Fermion-Energien $|\varepsilon(x)|$

$$\widehat{\Delta E} = \int_{-1}^{+1} dx \exp [-|\varepsilon(x)| \cdot T] , \quad (1.13)$$

wodurch eine alternative Darstellung dieser Größe gegeben ist (aus formalen Gründen weist $\widehat{\Delta E}$ hierbei eine L - T -Vertauschung gegenüber ΔE auf).

Dieses Integral wird ebenfalls im Rahmen einer Sattelpunktsentwicklung ausgewertet und bestätigt schließlich das frühere Ergebnis für die Energieaufspaltung bestens. Darüber hinaus können noch sehr interessante analytische Beziehungen gefunden werden, über welche sich die doch recht unterschiedlichen Verfahren aus Kapitel 5 und 6 ineinander überführen lassen.

Kapitel 7 schließt resümierend diese Arbeit ab.

Nachfolgend sind diverse Anhänge aufgeführt, von denen vor allem Anhang A hervorgehoben sei. Dieser behandelt einige im Hauptteil vorgebrachte Berechnungen anhand des eindimensionalen Ising-Modells, wodurch sie eine ungleich einfachere und übersichtlichere Struktur erhalten.

1.3 Historisches

1920 entwickelte Wilhelm Lenz in Rostock mit seiner Arbeit „Beitrag zum Verständnis der magnetischen Erscheinungen in festen Körpern“ [26] eine Modellidee zur mikroskopischen Beschreibung des Ferromagnetismus. Insbesondere sollte geklärt werden, wie sich eine spontane Magnetisierung ohne ein von außen angelegtes Magnetfeld ausbilden kann, welches dem Phasenübergang zwischen der para- und ferromagnetischen Phase gleichkommt. Die Grundidee bestand darin, auf Gitterplätzen lokalisierte Elemente („Spins“) mit ihren nächsten Nachbarn wechselwirken zu lassen, wobei jedes Element nur zwei Zustände einnehmen kann („spin up“ und „spin down“). Über die Wechselwirkung werden gleiche Zustände benachbarter Elemente (d.h. die Parallelstellung der Spins) energetisch bevorzugt. Mittlerweile in Hamburg seinen Forschungen nachgehend, übertrug er seinem Studenten Ernst Ising die Aufgabe, dieses Modell mathematisch auszuarbeiten. Ising behandelte den eindimensionalen Fall in seiner Dissertationsschrift [27] und veröffentlichte seine Resultate 1925 [4]. Er fand keinen Phasenübergang in einer Dimension, konnte das zweidimensionale Modell allerdings nicht lösen. Dieses negative Ergebnis war für die Beteiligten Lenz und Ising eine Enttäuschung. Insbesondere sagte die Weißsche Theorie den erhofften Phasenübergang auch in einer Dimension voraus; daß letztere auf der Mean-Field-Näherung (dt.: Molekularfeldnäherung) beruhende Theorie gerade die Fluktuationen vernachlässigt, die den Phasenübergang in einer Dimension verhindern, wurde damals noch nicht erkannt. Dadurch wurde diesem Modell, das später unter dem Namen Ising-Modell Berühmtheit erlangen sollte, zunächst wenig Beachtung geschenkt. Die einzige zeitgenössische Zitierung stammt aus dem Jahre 1928 von Werner Heisenberg [28], der aufgrund des vermeintlichen Versagens seitens Lenz und Ising eine kompliziertere Formulierung der Wechselwirkungen wählte, diese dann allerdings, wenn auch erfolgreich, in der Mean-Field-Theorie abhandelte. Historisch rückblickend bringt S.G. Brush [29] die inbegriffene Ironie treffend zum Ausdruck, indem er anmerkt, daß in Umkehrung der üblichen wissenschaftlichen Vorgehensweise zuerst das kompliziertere Heisenberg-Modell ausgiebig untersucht wurde, und man sich erst später dem einfacheren Ising-Modell zuwandte.

Es dauerte nämlich bis 1936, ehe man die Bedeutung der Dimensionalität erkannte: Rudolf Peierls lieferte in seiner Arbeit „On Ising’s Model of Ferromagnetism“ [5], ohne das Modell lösen zu können, den Existenzbeweis für einen Phasenübergang in zwei Dimensionen. Dies bedeutete eine schlagartige Wiederbelebung dieses zunächst vergessenen Modells; vermutlich hat Peierls auch den Namen „Ising-Modell“ geprägt.

(Hierzu gab es noch späte Nachträge: Griffiths [30] präsentierte 1964(!) eine modifizierte Version dieses Beweises, nachdem diverse Autoren [29] auf eine fehlerhafte Abschätzung in Peierls’ Originalbeweis hingewiesen hatten, den Peierls [31] jedoch 1966 als unbedeutend abtat.)

In den Folgejahren nach Peierls’ Veröffentlichung ging man entsprechend intensiv auf die Suche nach einer analytischen Lösung in zwei Dimensionen, die sich allerdings als außerordentlich schwierig herausstellte. Anfang der 40er Jahre fand man den Transfermatrixformalismus [6, 7, 8] als geeignetes algebraisches

Hilfsmittel, der die Lösung auf die Diagonalisierung der Transfermatrix bzw. auf deren Eigenwertbestimmung reduziert. Innerhalb dieses Formalismus gelang es Kramers und Wannier 1941 unter Verwendung einer sog. Dualitätstransformation zwischen Hoch- und Tief-Temperaturbereich [6], den kritischen Punkt \tilde{T}_C zu bestimmen, an dem der Phasenübergang stattfindet. Die Hinweise auf einen solchen verdichteten sich also zusehends.

Diese Entwicklung gipfelte 1944 in der exakten Lösung des zweidimensionalen Ising-Modells durch Lars Onsager [9], der ein hoher Stellenwert beizumessen ist. Unter anderem zeigt sie, daß die statistische Physik in der Lage ist, Phasenübergänge zu beschreiben, ohne auf Näherungsmethoden zurückgreifen zu müssen, wobei das Ising-Modell bis heute das einzige nicht-triviale Modell geblieben ist, bei welchem dies gelingt. Allerdings muß man sich auf zwei Dimensionen und ein verschwindendes äußeres Magnetfeld beschränken, da für die sonstigen Fälle bis heute noch keine analytische Lösung vorliegt. Insofern nimmt gerade das zweidimensionale Ising-Modell eine Ausnahmestellung in der statistischen Physik ein.

Obwohl nun eine exakte Lösung zur Verfügung stand, blieb doch ein gewisses Unbehagen bezüglich der aufwendigen und schwer nachvollziehbaren Vorgehensweise Onsagers. Eine bedeutende Vereinfachung der ursprünglichen Onsager-Lösung stammt 1949 von Bruria Kaufman [15], die mit Hilfe von Spindarstellungen eleganter und leichter nachvollziehbar dasselbe Ergebnis erzielte. Eine didaktische Aufbereitung findet sich in [32].

Nicht unerwähnt bleiben soll die Herleitung der spontanen Magnetisierung, des interessierenden Ordnungsparameters, durch C.N. Yang [33] aus dem Jahre 1952, die den Phasenübergang eindeutig und endgültig untermauerte.

In den nachfolgenden Jahren kam die sog. kombinatorische Lösung auf, die auf topologischem Geschick und Pfaffschen Normalformen beruht und mittlerweile in den meisten Lehrbüchern zu finden ist (in dieser Arbeit aber keine Rolle spielen wird). Die ersten Ideen hierzu stammen von van der Waerden [34] sowie Kac und Ward [35].

Eine weitere exakte Lösung des zweidimensionalen Ising-Modells, der in dieser Arbeit eine ebenso zentrale Bedeutung wie derjenigen nach Onsager und Kaufman zukommen wird, wurde 1964 von Schultz, Mattis und Lieb entwickelt. Mittels einer Jordan-Wigner-Transformation (deren Klassiker [18] entnommen) gelang ihnen eine geeignete Fermionisierung der klassischen Spin-Freiheitsgrade. Die Transfermatrix wird in dieser alternativen Formulierung über Fermionoperatoren in eine Besetzungszahldarstellung diagonalisiert. Anhand dieser Lösungsvariante lassen sich rein algebraische Ausdrücke aus der Onsager-Kaufman-Lösung mittels der Fermion-Sprache veranschaulichen, so daß sich diese beiden Verfahren geradezu gegenseitig ergänzen.

Diese verschiedenen Lösungsmethoden spiegeln das große Interesse, das dem Ising-Modell galt und bis heute gilt, welches sich zu einem Standardmodell in der statistischen Physik entwickelt hat. Mittlerweile sind über 16 000 Veröffentlichungen zu diesem gezählt worden [36], siehe hierzu Abb. 1.2. Die Anwendungen sind durchaus vielfältig. So bietet die analytische Lösung einen Prüfstand für Theorien dar, z.B. kann mittels der exakt zu berechnenden kritischen Exponenten die Gültigkeit der Skalengesetze einem ernsthaften und erfolgreichen Test

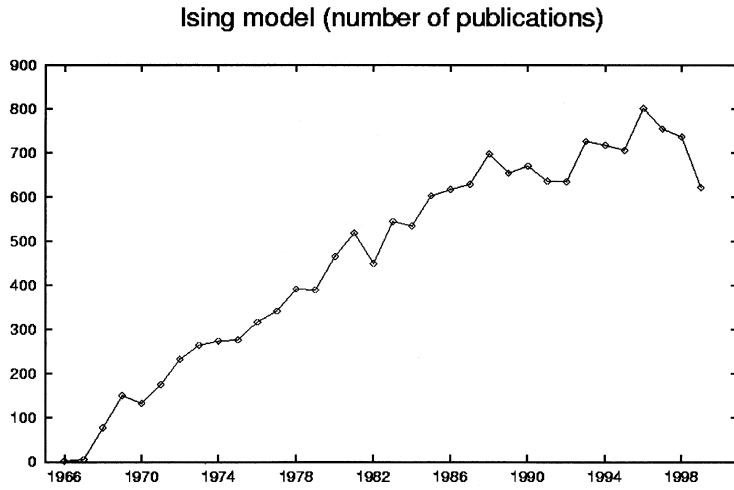


Abbildung 1.2: Anzahl jährlicher Veröffentlichungen über das Ising-Modell basierend auf der INSPEC-Datenbank, die insgesamt 6,5 Millionen Einträge führt [36]

unterzogen werden [2]. Zum anderen können hierüber Näherungsmethoden auf ihren Gültigkeitsbereich hin untersucht werden; ein Anwendungsfeld, welches sich geradezu aus der Historie des Ising-Modells erschließt. Speziell sind in höheren Dimensionen $d > 2$ mangels analytischer Lösungsmethoden heutzutage Computersimulationen mit Monte-Carlo-Verfahren weit verbreitet [37].

Wendet man sich dem Ising-Modell in seiner allgemeineren Definition von zunächst nicht näher bestimmten Elementen zu, die genau zwei diskrete Zustände einnehmen können, bleibt dieses keineswegs auf eine Beschreibung des Ferromagnetismus beschränkt: Häufige Anwendung innerhalb der Physik findet die Gittergas-Analogie [32]. Anstelle von „spin up“ und „spin down“ ist ein Gitterpunkt entweder von einem Gasteilchen besetzt oder unbesetzt, wobei eine anziehende Wechselwirkung für benachbarte besetzte Gitterplätze vorherrscht. Über die Ausbildung von Clustern kristallisiert sich der Übergang zur flüssigen Phase heraus. Auf ähnliche Weise lassen sich binäre Legierungen modellieren [32].

Derartige Verallgemeinerungen blieben nicht nur auf die Physik bezogen, sondern sprangen auch auf benachbarte Wissenschaftszweige über, dabei neue interdisziplinäre schaffend: Mittels des Prinzips der sozialen Imitation, welches aussagt, daß sich das Verhalten eines Individuums nach dem seiner Nachbarn richtet, werden kooperative Phänomene in vereinfachter Form einer mathematischen Beschreibung erschlossen. Als besonders anschauliches Beispiel sei hierzu der „Ising-Fisch“ [38] von Callen und Shapero genannt, der in zwei entgegengesetzte Richtungen schwimmen kann, sich dabei aber nach seinen Nachbarn richtet und somit durch soziale Imitation den Zusammenhalt eines Fischschwärms erklärt. Kohring [39] wiederum verwendete einen analogen Ansatz zur Model-

1.3. Historisches

lierung der Meinungsbildung in einem Zwei-Parteien-System. Dem recht jungen Zweig der Econophysics zuzuordnen ist der Versuch, auf diese Weise die in Kapitalmärkten beobachtbaren Kohärenzen zu beschreiben [40]. Das ebenfalls junge Gebiet der künstlichen neuronalen Netze wurde maßgeblich von dem Hopfield-Modell [41] feuernder und ruhender synaptisch gekoppelter Neuronen geprägt, welches 1982 auf der Basis des Ising-Modells formuliert wurde.

Mittlerweile haben sich u.a. zur Beantwortung derartiger Fragestellungen Erweiterungen des Ising-Modells entwickelt, welche eine Ausweitung der Modellannahmen vorsehen: Während das Potts-Modell [42] mehr als zwei diskrete Zustände pro Element zuläßt, geht das Sherrington-Kirkpatrick-Modell [43] von einer vollständigen Vernetzung aller Elemente mit einer gaußförmig ausdünnen-den Kopplung aus.

Ernst Ising, stets von der starken Resonanz auf das nach ihm benannte Modell ergriffen, vergaß in späteren Jahren nicht, auf den ursprünglichen Urheber zu verweisen:

„Ich weise gerne darauf hin, daß das Modell eigentlich Lenz-Ising-Modell heißen sollte... Mein Lehrer, Dr. Wilhelm Lenz, hatte die Idee...“ [36]

Kapitel 2

Onsager-Lösung des zweidimensionalen Ising-Modells nach Kaufman

2.1 Grundlagen

Es sei ein rechteckiges zweidimensionales Ising-Gitter mit T Zeilen und L Spalten gegeben. Die beiden Raumrichtungen werden mit t und x gekennzeichnet.

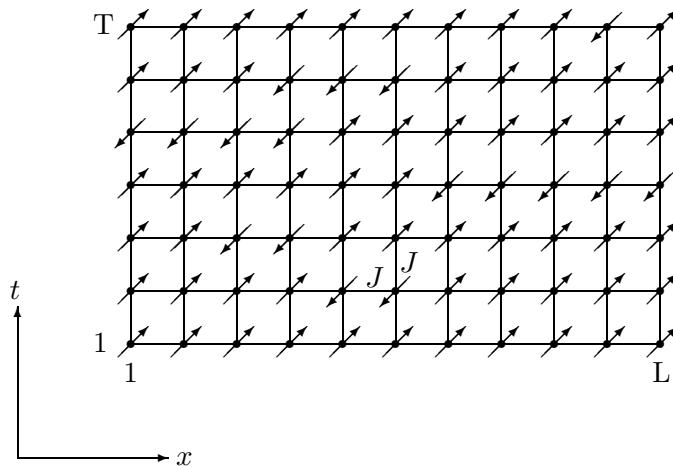


Abbildung 2.1: zweidimensionales Ising-Gitter

Jeder Gitterpunkt verfüge über einen Spin, der lediglich zwei diskrete Zustände einnehmen kann, wie durch die beiden unterschiedlichen Pfeilrichtungen ange deutet wird. Dies werde durch die klassische Spinvariable $s_i = \pm 1$ beschrieben. Für alle Spins bestehe über die Kopplungskonstante $J > 0$ eine homogene und isotrope Wechselwirkung nächster Nachbarn, die eine Parallelstellung zueinander energetisch bevorzuge. Im Allgemeinen können sich die Spins zusätzlich in

2. Onsager-Lösung des zweidimensionalen Ising-Modells nach Kaufman

einem äußeren Magnetfeld ausrichten, was hier jedoch keine Beachtung finden wird, da für diesen Fall keine analytische Lösung vorliegt.

Im Folgenden wird die Lösung nach Kaufman [15] vorgestellt, die in ihren Grundzügen der ursprünglichen [9] von Onsager entspricht. Letztere ist jedoch erheblich länger und verwickelter, während Kaufman [15] über die Spindarstellungen von Drehungen auf direktere Weise dasselbe Ergebnis erzielt. Dies ist ausführlich aufbereitet in [32].

Zunächst wird eine Zeilenvariable μ_t eingeführt, die die Spinkonfiguration der t -ten Zeile beschreibt:

$$\mu_t = \{s_1, s_2, \dots, s_L\}_{t-teZeile} .$$

Die Spinkonfiguration des gesamten Gitters ist dann durch $\{\mu_1, \mu_2, \dots, \mu_T\}$ gegeben.

Im Rahmen dieser Arbeit werden Randbedingungen eine wichtige Rolle spielen, besonders in Kapitel 3. Zu diesem Zeitpunkt ist aber erst einmal der einfachere Fall *periodischer Randbedingungen* von Interesse. Die Periodizität beziehe sich dabei auf Zeilen und Spalten, d.h.

$$\mu_{T+1} = \mu_1, \quad s_{L+1} = s_1 . \quad (2.1)$$

Topologisch bedeutet dies, daß das (bei freien Enden) flache zweidimensionale Gitter nun die Gestalt eines Torus annimmt. Aus diesem Grund nennt man (2.1) auch toroidale Randbedingungen.

Unter obigen Annahmen läßt sich die klassische Hamiltonfunktion \mathcal{H} des Ising-Gitters aufstellen, die (bei verschwindendem äußeren Feld) einzig durch die Wechselwirkungen bestimmt ist. Zu diesem Zweck werden folgende zwei Fälle unterschieden:

- Wechselwirkung nächster Nachbarn, die sich in derselben Zeile befinden

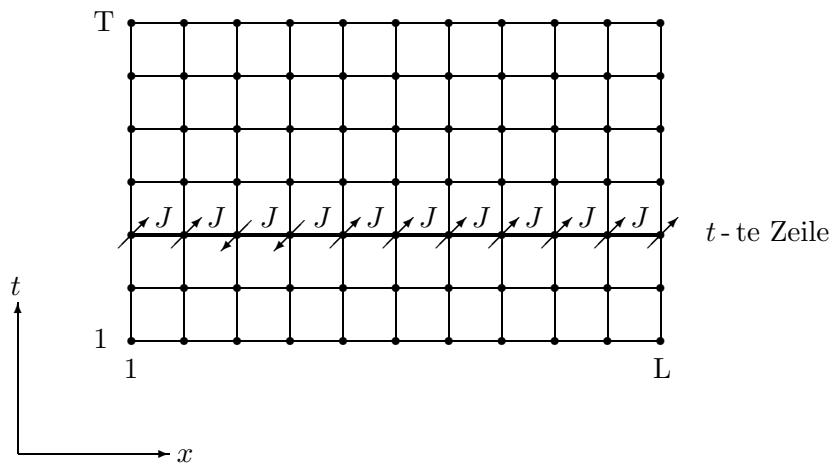


Abbildung 2.2: Wechselwirkung innerhalb einer Zeile

Für die t -te Zeile lautet der Wechselwirkungsterm:

$$\mathcal{H}(\mu_t) = - \sum_{k=1}^L s_k s_{k+1}. \quad (2.2)$$

Die graphische Veranschaulichung in Abb. 2.2 ist für das flache Gitter gegeben; der letzte Summand in (2.2) stammt aus der toroidalen Randbedingung (2.1).

- Wechselwirkung nächster Nachbarn, die sich in benachbarten Zeilen befinden

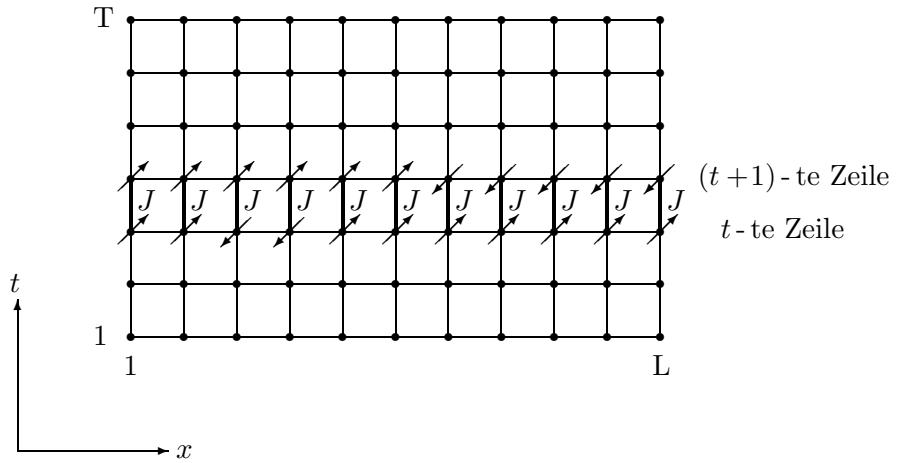


Abbildung 2.3: Wechselwirkung benachbarter Zeilen

Für die Zeilen μ_t und μ_{t+1} ergibt sich

$$\mathcal{H}(\mu_t, \mu_{t+1}) = - \sum_{k=1}^L s_k^{(t)} s_k^{(t+1)}, \quad (2.3)$$

wenn $s_k^{(t)}$ für die Spinvariable in der k -ten Spalte und t -ten Zeile steht.

Die Gesamtwechselwirkung \mathcal{H} ergibt sich dann aus (2.2) und (2.3), indem gemäß (2.1) über alle Zeilen summiert wird:

$$\mathcal{H} = \sum_{t=1}^T \{\mathcal{H}(\mu_t) + \mathcal{H}(\mu_t, \mu_{t+1})\}. \quad (2.4)$$

Die zentrale Größe solch statistischer Problemstellungen ist die Zustandssumme Z . In dem vorliegenden Fall ist sie gegeben durch

$$Z = \sum_{\mu_1} \dots \sum_{\mu_T} \exp(-\beta \mathcal{H}), \quad (2.5)$$

wobei sich die Summation über sämtliche Spinkonfigurationen des Gitters erstreckt. Im Folgenden nutzbringend ist die Kopplungskonstante J nicht in den

Wechselwirkungstermen (2.2) und (2.3), sondern bereits in β enthalten, d.h. es ist

$$\beta = \frac{J}{k_B \tilde{T}} \quad (2.6)$$

mit der Boltzmannkonstanten k_B und der Temperatur \tilde{T} .

Mit (2.4) schreibt sich die Zustandssumme (2.5)

$$Z = \sum_{\mu_1} \dots \sum_{\mu_T} \left(\prod_{t=1}^T \exp \left[-\beta \{ \mathcal{H}(\mu_t) + \mathcal{H}(\mu_t, \mu_{t+1}) \} \right] \right). \quad (2.7)$$

Der Ausgangspunkt der Lösung ist die Transfermatrix. Sie beschreibt die Propagation entlang einer Kette physikalischer Elemente [17]. Im vorliegenden Fall sei die Transfermatrix auf den Zeilen definiert über die Matrixelemente

$$\langle \mu_t | \mathcal{P} | \mu_{t+1} \rangle = \exp \left[-\beta \{ \mathcal{H}(\mu_t) + \mathcal{H}(\mu_t, \mu_{t+1}) \} \right] \quad (2.8)$$

und propagiere in Richtung der t -Achse (ab Kapitel 3 gilt dies nur eingeschränkt), was durch folgende Rechnung verdeutlicht wird.

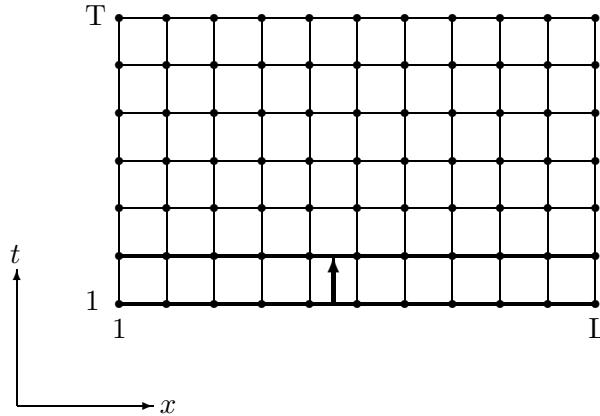


Abbildung 2.4: In t -Richtung propagierende Transfermatrix

Mittels (2.8) lässt sich die Zustandssumme (2.7) schreiben als

$$\begin{aligned} Z &= \sum_{\mu_1} \dots \sum_{\mu_T} \langle \mu_1 | \mathcal{P} | \mu_2 \rangle \langle \mu_2 | \mathcal{P} | \mu_3 \rangle \dots \langle \mu_T | \mathcal{P} | \mu_{T+1} \rangle \quad (2.9) \\ &= \sum_{\mu_1} \langle \mu_1 | \mathcal{P}^T | \mu_1 \rangle \\ &= \text{Sp}(\mathcal{P}^T), \end{aligned} \quad (2.10)$$

wobei Gebrauch gemacht wurde von der Vollständigkeit der Zustände und den periodischen Randbedingungen (2.1). Die Spur wird zweckmäßigerweise in der

Diagonalbasis berechnet, in der \mathcal{P} folgende Form hat:

$$\mathcal{P} = \begin{pmatrix} \rho_1 & & & & \\ & \rho_2 & & & 0 \\ 0 & & \ddots & & \\ & & & & \rho_{2^L} \end{pmatrix}.$$

Es handelt sich um eine $2^L \times 2^L$ -Matrix, da jede Zeile 2^L verschiedene Spinkonfigurationen aufweist.

Damit lautet nun die Zustandssumme (2.10):

$$Z = \sum_{i=1}^{2^L} (\rho_i)^T. \quad (2.11)$$

Aus der Kenntnis der Eigenwerte der Transfermatrix läßt sich also die Zustandssumme gewinnen. Der folgende Abschnitt beschäftigt sich mit deren Diagonalisierung.

Hierzu sei noch folgende Anmerkung beigefügt:

\mathcal{P} ist nach (2.8) offensichtlich nicht symmetrisch. Dieser Umstand könnte behoben werden durch eine entsprechende Symmetrisierung der Transfermatrix ($\mathcal{P} \rightarrow \mathcal{P}_S$), so daß deren Diagonalisierbarkeit direkt ersichtlich wäre:

$$\langle \mu_t | \mathcal{P}_S | \mu_{t+1} \rangle = \exp \left[-\beta \left\{ \frac{1}{2} \mathcal{H}(\mu_t) + \mathcal{H}(\mu_t, \mu_{t+1}) + \frac{1}{2} \mathcal{H}(\mu_{t+1}) \right\} \right]. \quad (2.12)$$

Nach (2.3) ist der Anteil $\mathcal{H}(\mu_t, \mu_{t+1}) = \mathcal{H}(\mu_{t+1}, \mu_t)$ bereits symmetrisch; der gesamte Ausdruck \mathcal{P}_S wäre es daher entsprechend

$$\langle \mu_t | \mathcal{P}_S | \mu_{t+1} \rangle = \langle \mu_{t+1} | \mathcal{P}_S | \mu_t \rangle.$$

Eine derartige Symmetrisierung muß im vorliegenden Fall jedoch nicht durchgeführt werden: Eine Diagonalisierung ist ebenfalls für die nichtsymmetrische Variante \mathcal{P} (2.8) möglich [32], wobei die oben erwähnte Diagonalbasis dann aus einer nicht-orthogonalen Transformation hervorgeht.

Aufgrund ihrer einfacheren Form wird daher im Folgenden in Anlehnung an [32] die Transfermatrix \mathcal{P} (2.8) verwendet, deren Diagonalisierungsverfahren nun erläutert wird.

2.2 Diagonalisierung der Transfermatrix

2.2.1 Aufteilung von \mathcal{P} in V_2 und V'_1

Die Transfermatrixelemente (2.8) zwischen den benachbarten Zeilen μ und μ'

$$\langle \mu | \mathcal{P} | \mu' \rangle = \exp \left[-\beta \{ \mathcal{H}(\mu) + \mathcal{H}(\mu, \mu') \} \right]$$

lauten mit (2.2) und (2.3) ausgeschrieben:

$$\langle s_1, \dots, s_L | \mathcal{P} | s'_1, \dots, s'_L \rangle = \prod_{k=1}^L \exp [\beta s_k s_{k+1}] \cdot \exp [\beta s_k s'_k].$$

Dies legt folgende Aufteilung nahe, die auch bei den Wechselwirkungstermen (Abb. 2.2 und Abb. 2.3) verwendet wurde:

$$\mathcal{P} = V_2 V'_1 \quad (2.13)$$

$$\text{mit } \langle s_1, \dots, s_L | V_2 | s'_1, \dots, s'_L \rangle = \delta_{s_1 s'_1} \dots \delta_{s_L s'_L} \prod_{k=1}^L \exp [\beta s_k s_{k+1}], \quad (2.14)$$

$$\langle s_1, \dots, s_L | V'_1 | s'_1, \dots, s'_L \rangle = \prod_{k=1}^L \exp [\beta s_k s'_k]. \quad (2.15)$$

V_2 beschreibt damit die Kopplung in x -Richtung und V'_1 diejenige in t -Richtung.

Im Falle einer symmetrisch gewählten Transfermatrix erhielt man anstatt (2.13) eine kompliziertere Aufspaltung; z.B. ergäbe sich für obige Symmetrisierung (2.12)

$$\mathcal{P}_S = V_2^{1/2} V'_1 V_2^{1/2}.$$

Verschiedene Varianten, die für bestimmte Berechnungszwecke vorteilhaft sind, werden in [17] diskutiert.

Hier wird die einfachere Aufteilung $\mathcal{P} = V_2 V'_1$ (2.13) verwendet.

2.2.2 Darstellung von V_2 und V'_1 als direkte Produkte

A, B, \dots, C seien $n \times p$ -Matrizen.

Definition: $A \times B \times \dots \times C$ heißt $(n$ -faches) direktes Produkt, falls

$$\langle ii' \dots i'' | A \times B \times \dots \times C | jj' \dots j'' \rangle = \langle i | A | j \rangle \langle i' | B | j' \rangle \dots \langle i'' | C | j'' \rangle. \quad (2.16)$$

$A \times B \times \dots \times C$ ist somit $p^n \times p^n$ -dimensional. (2.16) ist so zu verstehen, daß die Matrixelemente von A in der Basis $|i\rangle$, die Elemente von B in der Basis $|i'\rangle$, usw. berechnet werden.

Aus der Definition (2.16) folgen die Eigenschaften:

$$(A \times B \times \dots \times C) \cdot (D \times E \times \dots \times F) = (AD) \times (BE) \times \dots \times (CF); \\ A \times B \times \dots \times C = (A \times 1 \times \dots \times 1) \cdot (1 \times B \times \dots \times 1) \cdot \dots \cdot (1 \times 1 \times \dots \times C).$$

V'_1 und V_2 (jeweils $2^L \times 2^L$ -dimensional) können nun entsprechend den L Ising-Spins pro Zeile durch L -fache direkte Produkte von Paulimatrizen geeignet dargestellt werden.

(Man vergleiche mit dem eindimensionalen Modell: dort tritt lediglich eine einzelne Paulimatrix auf; in Anhang A.5 wird speziell auf den Übergang zu zwei Dimensionen eingegangen.)

Nach kurzer Rechnung [32] erhält man unter Benutzung der angegebenen Rechenregeln (siehe auch A.5):

$$V'_1 = [2 \sinh(2\beta)]^{\frac{L}{2}} \cdot \prod_{\alpha=1}^L \exp[\tilde{\beta} \sigma_{\alpha}^x] = [2 \sinh(2\beta)]^{\frac{L}{2}} \cdot V_1 \quad (2.17)$$

$$\text{mit } \tanh \tilde{\beta} = \exp[-2\beta]; \quad (2.18)$$

$$V_2 = \prod_{\alpha=1}^L \exp[\beta \sigma_{\alpha}^z \sigma_{\alpha+1}^z], \quad \text{mit } \sigma_{L+1}^z = \sigma_1^z \text{ wegen (2.1)}; \quad (2.19)$$

$$\sigma^x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma^z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}. \quad (2.20)$$

Dabei wurde definiert:

$$\sigma_{\alpha}^x = 1 \times 1 \times \dots \times \sigma^x \times \dots \times 1. \quad (2.21)$$

σ_{α}^x ist ein L -faches direktes Produkt, wobei σ^x an α -ter Stelle und sonst die Einheitsmatrix auftritt (σ_{α}^z analog).

(2.18) stellt die Dualitätstransformation zwischen der Hoch- und Tieftemperaturphase dar [6].

In der gewählten Darstellung ist offensichtlich V_2 diagonal (auch an (2.14) erkennbar), während V_1 dies nicht ist.

Entsprechende Basiszustände der Spins entnehme man A.5.

Somit ist (der Vorfaktor wurde in (2.17) herausdefiniert)

$$\mathcal{P} = [2 \sinh(2\beta)]^{\frac{L}{2}} \cdot V \quad \text{mit } V = V_2 \cdot V_1. \quad (2.22)$$

Für den nächsten Schritt wird die Kenntnis von Drehungen und deren Spindarstellungen benötigt, welche im folgenden Abschnitt bereitgestellt wird.

2.2.3 Drehungen und deren Spindarstellungen

Sei $\{\Gamma_\mu\}_{\mu=1,\dots,2L}$ ein System von $2L$ antikommutierenden Matrizen, d.h.

$$\Gamma_\mu \Gamma_\nu + \Gamma_\nu \Gamma_\mu = 2 \delta_{\mu\nu}, \quad (2.23)$$

und jedes Γ_μ eine $2^L \times 2^L$ -Matrix. Diese Matrizen mit der Eigenschaft (2.23) sind allgemein untersucht worden von Brauer und Weyl [44].

Zunächst werden die $\{\Gamma_\mu\}_{\mu=1,\dots,2L}$ in einem $2L$ -komponentigen Spaltenvektor zusammengefaßt:

$$(\Gamma_\alpha) = \begin{pmatrix} \Gamma_1 \\ \Gamma_2 \\ \vdots \\ \Gamma_{2L} \end{pmatrix}.$$

Eine Drehung dieses Vektors in der 2 -dimensionalen $\mu\nu$ -Ebene um den (komplexen) Winkel θ erreicht man mittels einer gewöhnlichen Drehmatrix $\omega(\mu\nu|\theta)$:

$$\text{mit } \omega(\mu\nu|\theta) = \begin{pmatrix} 1 & & & & & \\ & \ddots & & & & \\ & & \cos \theta & \cdots & \sin \theta & \\ & & \vdots & & \vdots & \\ & & -\sin \theta & \cdots & \cos \theta & \\ & & & & \ddots & \\ & & & & & 1 \end{pmatrix},$$

wobei die Winkelfunktionen in der μ -ten und ν -ten Spalte bzw. Zeile auftauchen. Die folgenden beiden Sätze werden bei der Diagonalisierung der Transfermatrix \mathcal{P} bzw. V von enormem Nutzen sein. Die Beweise sind in [32] nachzulesen.

$$\text{Satz 1: } (\Gamma'_\alpha) = \omega(\mu\nu|\theta) (\Gamma_\alpha) \quad (2.24)$$

$$\iff \Gamma'_\alpha = S(\omega) \cdot \Gamma_\alpha \cdot S^{-1}(\omega) \quad (2.25)$$

$$\text{mit } S(\omega) = S_{\mu\nu}(\theta) = \exp \left[-\frac{\theta}{2} \Gamma_\mu \Gamma_\nu \right].$$

ω transformiert in (2.24) einen $2L$ -komponentigen Vektor und hat demzufolge die Dimension $2L \times 2L$. $S(\omega)$ in (2.25) hingegen transformiert eine Komponente dieses Vektors, die ihrerseits eine $2^L \times 2^L$ -Matrix darstellt. Entsprechend hat $S(\omega)$ die Dimension $2^L \times 2^L$.

Man nennt ω Drehung und $S(\omega)$ Spindarstellung der Drehung ω .

Gemäß Satz 1 kann also jeder Drehung eine Spindarstellung zugeordnet werden und umgekehrt. Dies wird später explizit ausgenutzt.

Satz 2:

$$\omega = \omega(\alpha\beta|\theta_1) \cdot \omega(\gamma\delta|\theta_2) \cdot \dots \cdot \omega(\mu\nu|\theta_n) \quad (2.26)$$

$$\iff S(\omega) = \exp\left[-\frac{1}{2}\theta_1\Gamma_\alpha\Gamma_\beta\right] \cdot \exp\left[-\frac{1}{2}\theta_2\Gamma_\gamma\Gamma_\delta\right] \cdot \dots \cdot \exp\left[-\frac{1}{2}\theta_n\Gamma_\mu\Gamma_\nu\right]. \quad (2.27)$$

Dabei hat ω die $2L$ Eigenwerte $\exp[\pm i\theta_1], \exp[\pm i\theta_2], \dots, \exp[\pm i\theta_L]$ (2.28)

$$\text{und } S(\omega) \text{ die } 2^L \text{ Eigenwerte } \exp\left[\frac{i}{2}(\pm\theta_1 \pm \theta_2 \pm \dots \pm \theta_n)\right]. \quad (2.29)$$

In (2.29) sind sämtliche \pm unabhängig zu wählen. (2.28) sind die gewohnten Eigenwerte von Drehmatrizen. Satz 2 enthält also folgende Aussage: Aus der Kenntnis der Eigenwerte der Drehung ω lässt sich auf die Eigenwerte der zugehörigen Spindarstellung $S(\omega)$ schließen und umgekehrt.

Aus Satz 1 und Satz 2 folgt nun: Zur Diagonalisierung der Spindarstellung einer Drehung ist es lediglich nötig, die (niederdimensionale) Drehung zu diagonalisieren.

Die Vereinfachung von Kaufmans Lösung [15] gegenüber der ursprünglichen von Onsager [9] beruht auf der Ausnutzung dieses Sachverhalts.

2.2.4 Formulierung von V_1 und V_2 als Spindarstellungen

Die $\{\Gamma_\mu\}_{\mu=1,\dots,2L}$ aus dem vorigen Abschnitt lassen sich durch die Paulimatrizen σ^i , $i = x, y, z$ darstellen. Eine spezielle Wahl unter Verwendung von (2.21) ist

$$\begin{aligned} \Gamma_{2\alpha} &= \sigma_1^x \sigma_2^x \dots \sigma_{\alpha-1}^x \sigma_\alpha^y \\ \Gamma_{2\alpha-1} &= \sigma_1^x \sigma_2^x \dots \sigma_{\alpha-1}^x \sigma_\alpha^z \end{aligned} \quad \text{für } \alpha = 1, \dots, L. \quad (2.30)$$

Hieraus folgt:

$$\Gamma_{2\alpha}\Gamma_{2\alpha-1} = i\sigma_\alpha^x, \quad \alpha = 1, \dots, L,$$

$$\Gamma_{2\alpha+1}\Gamma_{2\alpha} = i\sigma_\alpha^z \sigma_{\alpha+1}^z, \quad \alpha = 1, \dots, L-1,$$

$$\Gamma_1\Gamma_{2L} = -iU\sigma_L^z\sigma_1^z \quad (2.31)$$

$$\text{mit } U = \sigma_1^x \sigma_2^x \dots \sigma_L^x = \sigma^x \times \sigma^x \times \dots \times \sigma^x. \quad (2.32)$$

Damit lautet (2.17):

$$V_1 = \prod_{\alpha=1}^L \exp[-i\tilde{\beta}\Gamma_{2\alpha}\Gamma_{2\alpha-1}]. \quad (2.33)$$

Vergleicht man diese Form mit (2.27), so erkennt man, daß V_1 die Spindarstellung einer Drehung ist.

Für V_2 erhält man aus (2.19):

$$V_2 = \exp[i\beta U\Gamma_1\Gamma_{2L}] \prod_{\alpha=1}^{L-1} \exp[-i\beta\Gamma_{2\alpha+1}\Gamma_{2\alpha}]. \quad (2.34)$$

Bis auf den ersten Faktor $\exp[i\beta U \Gamma_1 \Gamma_{2L}]$ handelt es sich bei V_2 ebenfalls um eine Spindarstellung. Er stammt aus der Randbedingung (2.1), die $\sigma_{L+1}^z = +\sigma_1^z$ bewirkt.

2.2.5 Aufspaltung von V in V^+ und V^- durch Randbedingungen

Der Ausdruck $\exp[i\beta U \Gamma_1 \Gamma_{2L}]$ soll näher betrachtet werden. Aus den Antikommutatorregeln folgt

$$(iU \Gamma_1 \Gamma_{2L})^2 = -U \Gamma_1 \Gamma_{2L} U \Gamma_1 \Gamma_{2L} = -U^2 (\Gamma_1 \Gamma_{2L})^2 = +1,$$

da $U^2 = 1$ und U mit einer geraden Anzahl an Γ -Matrizen vertauscht.
Da für Matrizen A mit $A^2 = 1$ $\exp(\theta A) = \cosh \theta + A \sinh \theta$ gilt, folgt:

$$\begin{aligned} \exp[i\beta U \Gamma_1 \Gamma_{2L}] &= \cosh \beta + iU \Gamma_1 \Gamma_{2L} \sinh \beta \\ &= \underbrace{\left[\frac{1}{2}(1+U) + \frac{1}{2}(1-U) \right]}_{=1} [\cosh \beta + iU \Gamma_1 \Gamma_{2L} \sinh \beta] \\ &= \frac{1}{2}(1+U) [\cosh \beta + i\Gamma_1 \Gamma_{2L} \sinh \beta] + \frac{1}{2}(1-U) [\cosh \beta - i\Gamma_1 \Gamma_{2L} \sinh \beta] \\ &\quad \text{wegen } U^2 = 1 \\ &= \frac{1}{2}(1+U) \exp[i\beta \Gamma_1 \Gamma_{2L}] + \frac{1}{2}(1-U) \exp[-i\beta \Gamma_1 \Gamma_{2L}] \end{aligned} \tag{2.35}$$

Mit (2.35) folgt für $V = V_2 V_1$ mit (2.33) und (2.34):

$$V = \frac{1}{2}(1+U) V^+ + \frac{1}{2}(1-U) V^- \tag{2.36}$$

$$\text{mit } V^\pm = \exp[\pm i\beta \Gamma_1 \Gamma_{2L}] \prod_{\alpha=1}^{L-1} \exp[-i\beta \Gamma_{2\alpha+1} \Gamma_{2\alpha}] \prod_{\lambda=1}^L \exp[-i\tilde{\beta} \Gamma_{2\lambda} \Gamma_{2\lambda-1}]. \tag{2.37}$$

V^+ und V^- sind offensichtlich Spindarstellungen.

Es bleibt festzuhalten, daß die Aufspaltung (2.36) durch die Randbedingungen (2.1) verursacht wurde.

2.2.6 Diagonalisierung von U

Da U, V^+ und V^- kommutieren, können sie gleichzeitig diagonalisiert werden. Mittels der Transformationsmatrix R werde U in Diagonalform gebracht:

$$\begin{aligned}\tilde{V} &= RVR^{-1} = \frac{1}{2}(1 + \tilde{U})\tilde{V}^+ + \frac{1}{2}(1 - \tilde{U})\tilde{V}^- \\ \text{mit } \tilde{V}^\pm &= RV^\pm R^{-1}, \\ \tilde{U} &= RUR^{-1} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}. \end{aligned}\quad (2.38)$$

In (2.38) ist 1 die $2^{L-1} \times 2^{L-1}$ -Einheitsmatrix. \tilde{U} ergibt sich aus (2.32), indem man in dessen Diagonalform $\sigma^z \times \sigma^z \times \dots \times \sigma^z + 1$ und -1 entsprechend umordnet.

Aus der Vertauschbarkeit von \tilde{U} mit \tilde{V}^\pm folgt:

$$\tilde{V}^+ = \begin{pmatrix} \mathcal{A}^+ & 0 \\ 0 & \mathcal{B}^+ \end{pmatrix}, \quad \tilde{V}^- = \begin{pmatrix} \mathcal{A}^- & 0 \\ 0 & \mathcal{B}^- \end{pmatrix}.$$

$\frac{1}{2}(1 + \tilde{U})$ und $\frac{1}{2}(1 - \tilde{U})$ sind offensichtlich Projektoren, die die Einheitsmatrix auf die obere bzw. untere Matrixhälfte abbilden. Sie sind komplementär zueinander, wie man an $\frac{1}{2}(1 + \tilde{U}) \cdot \frac{1}{2}(1 - \tilde{U}) = 0$ erkennt. Insbesondere folgt:

$$\frac{1}{2}(1 + \tilde{U})\tilde{V}^+ = \begin{pmatrix} \mathcal{A}^+ & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad \frac{1}{2}(1 - \tilde{U})\tilde{V}^- = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & \mathcal{B}^- \end{pmatrix}. \quad (2.39)$$

\mathcal{A}^+ und \mathcal{B}^- (nicht notwendig diagonal) sind jeweils $2^{L-1} \times 2^{L-1}$ -dimensional und haben dementsprechend 2^{L-1} Eigenwerte. Man kann also nach (2.39) mit einer unabhängigen Diagonalisierung von $\frac{1}{2}(1 + \tilde{U})\tilde{V}^+$ und $\frac{1}{2}(1 - \tilde{U})\tilde{V}^-$ fortfahren und anschließend deren beide Eigenwertsätze zusammen als Eigenwertsatz für \tilde{V} und damit für V identifizieren. Letzterer enthält die gesuchten 2^L Eigenwerte.

Es wird folgendermaßen fortfahren:

V^+ und V^- werden getrennt diagonalisiert, und man erhält jeweils 2^L Eigenwerte. Durch die Transformation zu \tilde{V}^+ und \tilde{V}^- ändern sich diese selbstverständlich nicht. Schließlich wird über $\frac{1}{2}(1 + \tilde{U})\tilde{V}^+$ und $\frac{1}{2}(1 - \tilde{U})\tilde{V}^-$ jeweils die Hälfte an Eigenwerten aussortiert, man behält also jeweils 2^{L-1} . Diese zusammengekommenen ergeben dann die 2^L gewünschten Eigenwerte.

2.2.7 Die Symmetrie U und Beiträge zur Zustandssumme

Obiger Sachverhalt kann noch in anderem Licht beleuchtet werden.

U ist eine Symmetrie, da U mit V vertauscht (zur Definition des Hamiltonoperators siehe Abschnitt 2.2.10). Die physikalische Bedeutung dieser Symmetrie tritt in 3.1.2 zutage, wo U die Rolle eines Spinumkehroperators einnimmt.

Wegen $U^2 = 1$ kann nach symmetrischen und antisymmetrischen Zuständen unterschieden werden:

Aufgrund von

$$\frac{1}{2}(1 + U)U = +\frac{1}{2}(1 + U)$$

projiziert $\frac{1}{2}(1+U)$ auf symmetrische Zustände $|\psi_S\rangle$, für die

$$U|\psi_S\rangle = +|\psi_S\rangle \quad (2.40)$$

gilt.

Antisymmetrische Zustände $|\psi_A\rangle$ mit

$$U|\psi_A\rangle = -|\psi_A\rangle \quad (2.41)$$

erhält man wegen

$$\frac{1}{2}(1-U)U = -\frac{1}{2}(1-U)$$

über den Projektor $\frac{1}{2}(1-U)$.

Damit lassen sich die Beiträge von V^+ und V^- zur Zustandssumme (2.10)

$$Z = \text{Sp}(\mathcal{P}^T)$$

geeignet charakterisieren. Dabei wird es sich im Weiteren als nützlich erweisen, den Vorfaktor in (2.22) aus dieser und folgenden Zustandssummen herauszunehmen:

$$Z = [2 \sinh(2\beta)]^{\frac{LT}{2}} \cdot Z'. \quad (2.42)$$

Mit (2.36) ergibt sich

$$Z' = \text{Sp} \left[\frac{1}{2}(1+U)V^+ \right]^T + \text{Sp} \left[\frac{1}{2}(1-U)V^- \right]^T,$$

da die Spurbildung nach (2.39) getrennt erfolgen kann.

Aufgrund der Idempotenz der Projektoren

$$\left[\frac{1}{2}(1+U) \right]^T = \frac{1}{2}(1+U) \quad \text{und} \quad \left[\frac{1}{2}(1-U) \right]^T = \frac{1}{2}(1-U) \quad (2.43)$$

folgt:

$$Z' = \text{Sp} \left[\frac{1}{2}(1+U)(V^+)^T \right] + \text{Sp} \left[\frac{1}{2}(1-U)(V^-)^T \right]. \quad (2.44)$$

Zur Zustandssumme trägt also von den 2^L Eigenwerten von V^+ lediglich diejenige Hälfte bei, die zu symmetrischen Eigenvektoren gehört. Beiträge von V^- hingegen liefern nur die zu antisymmetrischen Eigenvektoren gehörenden Eigenwerte.

2.2.8 Die Eigenwerte von V^+ und V^-

Wie in Abschnitt 2.2.3 erläutert wurde, ist es zur Diagonalisierung der $2^L \times 2^L$ -dimensionalen Spindarstellungen V^\pm lediglich nötig, die zugehörigen $2L \times 2L$ -dimensionalen Drehungen zu diagonalisieren.

Nach Satz 2 (Gln. (2.26) und (2.27)) lassen sich den V^\pm in (2.37) folgende Drehungen Ω^\pm zuordnen:

$$\Omega^\pm = \omega(1, 2L | \mp 2i\beta) \prod_{\alpha=1}^{L-1} \omega(2\alpha + 1, 2\alpha | + 2i\beta) \prod_{\lambda=1}^L \omega(2\lambda, 2\lambda - 1 | + 2i\tilde{\beta}).$$

Die Diagonalisierung von Ω^\pm erfolgt in einer längeren Rechnung, die aber keine prinzipiellen Hürden mehr in den Weg stellt. Es sei daher erlaubt, auf die Ergebnisse in [15, 32] zu verweisen:

Eigenwerte von Ω^+ : $\exp[\pm\varepsilon_1], \exp[\pm\varepsilon_3], \exp[\pm\varepsilon_5], \dots, \exp[\pm\varepsilon_{2L-1}]$; (2.45)

Eigenwerte von Ω^- : $\exp[\pm\varepsilon_0], \exp[\pm\varepsilon_2], \exp[\pm\varepsilon_4], \dots, \exp[\pm\varepsilon_{2L-2}]$. (2.46)

Nach Satz 2 (Gln. (2.28) und (2.29)) haben die zugeordneten Spindarstellungen V^+ und V^- dann folgende Eigenwerte:

$$\text{Eigenwerte von } V^+ : \exp\left[\frac{1}{2}(\pm\varepsilon_1 \pm \varepsilon_3 \pm \varepsilon_5 \pm \dots \pm \varepsilon_{2L-1})\right]; \quad (2.47)$$

$$\text{Eigenwerte von } V^- : \exp\left[\frac{1}{2}(\pm\varepsilon_0 \pm \varepsilon_2 \pm \varepsilon_4 \pm \dots \pm \varepsilon_{2L-2})\right]. \quad (2.48)$$

Die Vorzeichen in (2.47) und (2.48) sind unabhängig zu wählen. Dies ergibt jeweils 2^L Eigenwerte für V^+ und V^- .

Dabei ist

$$\cosh(\varepsilon_k) = \cosh(2\beta)\cosh(2\tilde{\beta}) - \sinh(2\beta)\sinh(2\tilde{\beta})\cos\left(\frac{\pi k}{L}\right);$$

Da die Kopplung in horizontaler und vertikaler Richtung die gleiche ist, gilt aufgrund der Dualität (2.18)

$$\sinh(2\beta)\sinh(2\tilde{\beta}) = 1, \quad (2.49)$$

so daß die einfachere Form

$$\cosh(\varepsilon_k) = \cosh(2\beta)\cosh(2\tilde{\beta}) - \cos\left(\frac{\pi k}{L}\right) \quad (2.50)$$

folgt. Mit

$$m_0 = 2|\beta - \tilde{\beta}| \quad (2.51)$$

und $\cosh(2\beta)\cosh(2\tilde{\beta}) = \cosh(m_0) + 1$ ergibt sich eine nützliche Darstellung:

$$\cosh(\varepsilon_k) = \cosh(m_0) + 1 - \cos(p_k); \quad (2.52)$$

$$p_k = \frac{\pi k}{L}, \quad k = 0, 1, \dots, 2L - 1. \quad (2.53)$$

Lösungen zu (2.52) für ε_k können mit beiden Vorzeichen auftreten. Dies ist kein Widerspruch, da in (2.45) - (2.48) ebenfalls beide Vorzeichen vorkommen. Man muß sich allerdings für eine Vorzeichenkonvention entscheiden.

Für ε_k mit $k \neq 0$ werde stets der positive Arcosh-Zweig verwendet:

$$\varepsilon_k = +\text{Arcosh} \{ \cosh(m_0) + 1 - \cos(p_k) \}, \quad k = 1, \dots, 2L-1. \quad (2.54)$$

Bei $k=0$ folgt $\cosh(\varepsilon_0) = \cosh(m_0)$, d.h. $\varepsilon_0 = \pm m_0$ mit $m_0 > 0$ sind zulässige Lösungen. Obwohl es auf den ersten Blick unnötig kompliziert erscheint, hat es im Folgenden Vorteile, daß ε_0 am kritischen Punkt $\beta = \beta_C$, gleichbedeutend mit $\beta = \tilde{\beta}$ (siehe Abschnitt 2.4), sein Vorzeichen wechselt. Der Notation in [17] folgend wird gewählt:

$$\varepsilon_0 = 2(\tilde{\beta} - \beta) = \begin{cases} +m_0 & \text{für } \beta < \beta_C, \\ -m_0 & \text{für } \beta > \beta_C. \end{cases} \quad (2.55)$$

Als Eigenschaften folgen aus der Periodizität des Kosinus

$$|\varepsilon_k| = |\varepsilon_{2L-k}| \quad (2.56)$$

sowie aus dessen Verhalten

$$0 \leq |\varepsilon_0| < \varepsilon_1 < \varepsilon_2 < \dots < \varepsilon_L. \quad (2.57)$$

Diese werden durch die folgenden Graphen verdeutlicht.

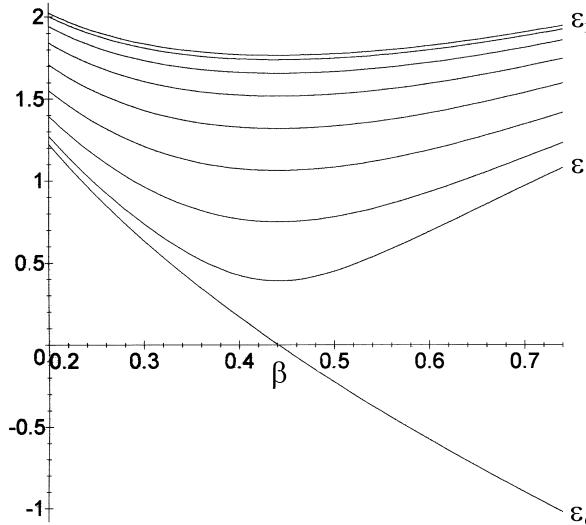


Abbildung 2.5: Die verschiedenen ε_k für $L = 8$

Zur Veranschaulichung der k -Abhängigkeit bei festgehaltener Temperatur wird die für große L quasikontinuierliche Variable $x = \frac{k}{L}$ verwendet (man vergleiche mit der späteren Definition (5.13)). In deren Abhängigkeit zeigt sich (unter Aufhebung der Beschränkung der k -Werte in (2.53)) das Verhalten (2.56) und (2.57):

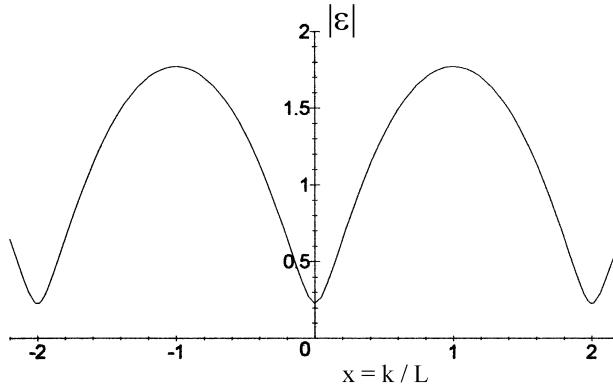


Abbildung 2.6: $|\varepsilon|$ in Abhängigkeit von $x = \frac{k}{L}$ bei $\beta = 0,5$

2.2.9 Die Eigenwerte von V

Nachdem mit (2.47) und (2.48) jeweils 2^L Eigenwerte für V^+ und V^- gefunden wurden, muß noch jeweils die Hälfte von ihnen aussortiert werden. Dies gelingt über die Projektoren $\frac{1}{2}(1 + \tilde{U})$ und $\frac{1}{2}(1 - \tilde{U})$.

Den Eigenwerten (2.47) und (2.48) lassen sich mit Satz 2 mögliche Diagonalfomren von V^+ und V^- entnehmen; diese sollen durch die Transformationsmatrizen F und D erzeugt werden:

$$F\tilde{V}^+F^{-1} = \tilde{V}_F^+, \quad D\tilde{V}^-D^{-1} = \tilde{V}_D^-.$$

Nach Abschnitt 2.2.6 sollten $\frac{1}{2}(1 + \tilde{U})\tilde{V}^+$ und $\frac{1}{2}(1 - \tilde{U})\tilde{V}^-$ (unabhängig) diagonalisiert werden. Daher muß die Transformation über F bzw. D auf den gesamten Ausdruck wirken:

$$\begin{aligned} F \left[\frac{1}{2}(1 + \tilde{U})\tilde{V}^+ \right] F^{-1} &= \frac{1}{2} (1 + F\tilde{U}F^{-1}) \tilde{V}_F^+, \\ D \left[\frac{1}{2}(1 - \tilde{U})\tilde{V}^- \right] D^{-1} &= \frac{1}{2} (1 - D\tilde{U}D^{-1}) \tilde{V}_D^-. \end{aligned}$$

Kaufman zeigt durch Konstruktion [15]:

$$F\tilde{U}F^{-1} = \tilde{U}, \quad D\tilde{U}D^{-1} = \tilde{U}. \quad (2.58)$$

Dies führt zu

$$\begin{aligned} F \left[\frac{1}{2}(1 + \tilde{U})\tilde{V}^+ \right] F^{-1} &= \frac{1}{2} (1 + \tilde{U}) \tilde{V}_F^+, \\ D \left[\frac{1}{2}(1 - \tilde{U})\tilde{V}^- \right] D^{-1} &= \frac{1}{2} (1 - \tilde{U}) \tilde{V}_D^-. \end{aligned}$$

In [15] wird gezeigt, daß $\frac{1}{2}(1 + \tilde{U})$ von den Eigenwerten (2.47),(2.48) diejenigen mit einer geraden Anzahl an Minuszeichen auswählt, $\frac{1}{2}(1 - \tilde{U})$ hingegen diejenigen mit einer ungeraden Anzahl an Minuszeichen. Es ergeben sich somit folgende Eigenwerte für V :

$$\exp \left[\frac{1}{2} (\pm \varepsilon_1 \pm \varepsilon_3 \pm \varepsilon_5 \pm \dots \pm \varepsilon_{2L-1}) \right] \quad \text{aus } V^+ ; \quad (2.59)$$

mit gerader Anzahl an Minuszeichen

$$\exp \left[\frac{1}{2} (\pm \varepsilon_0 \pm \varepsilon_2 \pm \varepsilon_4 \pm \dots \pm \varepsilon_{2L-2}) \right] \quad \text{aus } V^- . \quad (2.60)$$

mit ungerader Anzahl an Minuszeichen

Es soll noch erwähnt werden, daß Kaufman in [15] eine andere Vorzeichenkonvention wählt als in Gl.(2.55) und Abb. 2.5. Zur Unterscheidung wird γ_k statt ε_k verwendet. Sie wählt:

$$\gamma_0 = -\varepsilon_0 , \quad \gamma_k = \varepsilon_k \quad \text{für } k = 1, \dots, 2L-1 . \quad (2.61)$$

Dies hat zur Folge, daß die Diagonalisierung von \tilde{V}^- nicht über D , sondern eine andere Transformationsmatrix G geschieht. Wie [15] explizit zu entnehmen ist, hat G dann im Gegensatz zu (2.58) die Eigenschaft $G\tilde{U}G^{-1} = -\tilde{U}$.

Damit werden sowohl bei V^+ und V^- wegen

$$F \left[\frac{1}{2}(1 + \tilde{U})\tilde{V}^+ \right] F^{-1} = \frac{1}{2} (1 + \tilde{U}) \tilde{V}_F^+ ,$$

$$G \left[\frac{1}{2}(1 - \tilde{U})\tilde{V}^- \right] G^{-1} = \frac{1}{2} (1 + \tilde{U}) \tilde{V}_G^-$$

Eigenwerte mit einer geraden Anzahl an Minuszeichen ausgewählt:

$$\exp \left[\frac{1}{2} (\pm \gamma_1 \pm \gamma_3 \pm \gamma_5 \pm \dots \pm \gamma_{2L-1}) \right] \quad \text{aus } V^+ ; \quad (2.62)$$

mit gerader Anzahl an Minuszeichen

$$\exp \left[\frac{1}{2} (\pm \gamma_0 \pm \gamma_2 \pm \gamma_4 \pm \dots \pm \gamma_{2L-2}) \right] \quad \text{aus } V^- . \quad (2.63)$$

mit gerader Anzahl an Minuszeichen

Man macht sich schnell klar, daß (2.62),(2.63) wegen $\pm \gamma_0 = \mp \varepsilon_0$ nach (2.61) mit (2.59),(2.60) identisch ist.

Dieser Vergleich soll zudem verdeutlichen, daß die Auswahl der Hälfte an Eigenwerten stets eindeutig ist.

Nun wird auch ersichtlich, warum es ungünstig wäre, γ_0 bzw. ε_0 in beiden Temperaturbereichen positiv zu wählen: Unterhalb der kritischen Temperatur ($\beta > \tilde{\beta}$) hätte man von den Eigenwerten

$$\exp \left[\frac{1}{2} (\pm |\varepsilon_0| \pm \varepsilon_2 \pm \varepsilon_4 \pm \dots \pm \varepsilon_{2L-2}) \right]$$

diejenigen mit einer geraden Anzahl an Minuszeichen, oberhalb ($\beta < \tilde{\beta}$) diejenigen mit einer ungeraden.

2.2.10 Diskussion des Spektrums

λ_i bezeichne die 2^L Eigenwerte (2.59), (2.60) von V . Es folgt deren graphische Darstellung für verschiedene L .

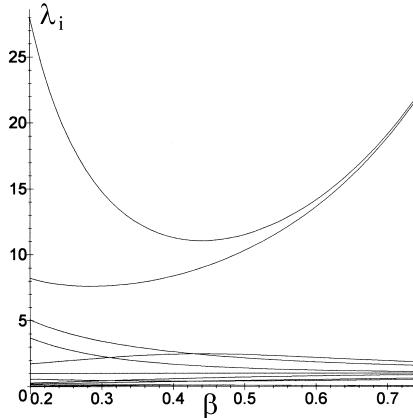


Abbildung 2.7: $L = 4$

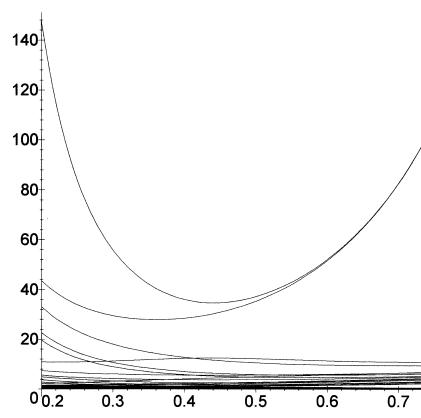


Abbildung 2.8: $L = 6$

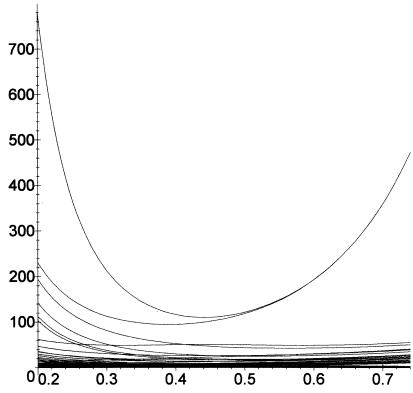


Abbildung 2.9: $L = 8$

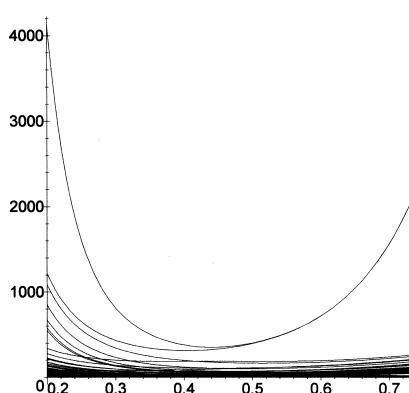


Abbildung 2.10: $L = 10$

Unterhalb der kritischen Temperatur, gleichbedeutend mit $\beta > 0,44$ (siehe Abschnitt 2.4) sind die beiden größten Eigenwerte nahezu entartet, insbesondere für große L . Die nächst kleineren Eigenwerte folgen mit größerem Abstand.

Aufgrund von (2.57) lauten die beiden größten Eigenwerte:

$$\lambda_{0+} = \exp \left[\frac{1}{2} (+\varepsilon_1 + \varepsilon_3 + \varepsilon_5 + \dots + \varepsilon_{2L-1}) \right]; \quad (2.64)$$

$$\lambda_{0-} = \exp \left[\frac{1}{2} (+|\varepsilon_0| + \varepsilon_2 + \varepsilon_4 + \dots + \varepsilon_{2L-2}) \right]; \quad (2.65)$$

dabei ist $\lambda_{0+} \geq \lambda_{0-}$.

2. Onsager-Lösung des zweidimensionalen Ising-Modells
nach Kaufman

Das Gleichheitszeichen gilt im Limes $L \rightarrow \infty$, wo wegen

$$\lim_{L \rightarrow \infty} |\varepsilon_{2k}| = \lim_{L \rightarrow \infty} |\varepsilon_{2k+1}| \quad (2.66)$$

Entartung eintritt.

λ_{0+} wird daher als λ_{max} bezeichnet. Es gehört zu einem symmetrischen Zustand, während λ_{0-} einem antisymmetrischen entstammt.

Da λ_{0-} wegen (2.55) für $\beta < \beta_C$ nicht im Spektrum liegt, ist in diesem Temperaturbereich λ_{0+} mit Abstand einziger größter Eigenwert (vgl. [17]).

Das Entartungsverhalten wird verdeutlicht durch folgende Graphen, in denen λ_i/λ_{max} aufgetragen ist.

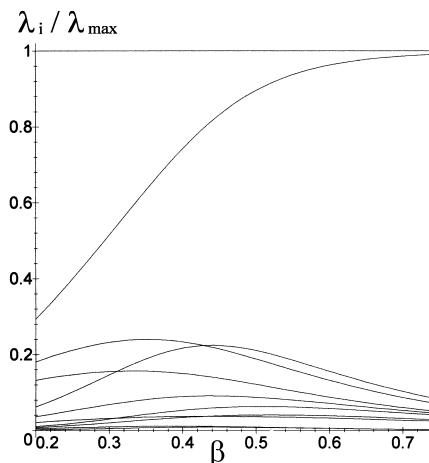


Abbildung 2.11: $L = 4$

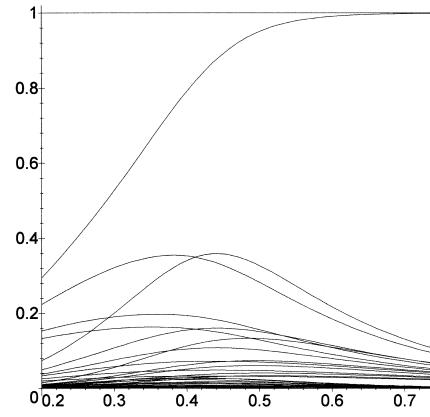


Abbildung 2.12: $L = 6$

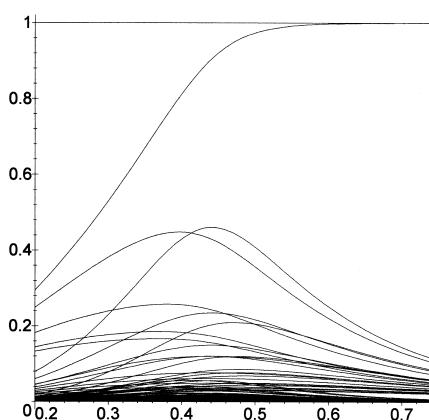


Abbildung 2.13: $L = 8$

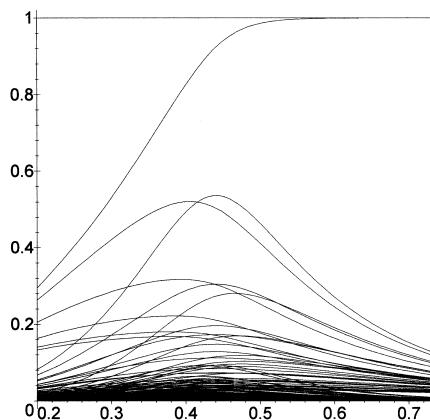


Abbildung 2.14: $L = 10$

Über die Transfermatrix V wird der Hamilton-Operator H im Sinne der Quantentheorie folgendermaßen definiert:

$$V = \exp[-H]. \quad (2.67)$$

Es handelt sich dabei um die übliche Definition, vgl. z.B. [16]. Man erhält hierüber ein analoges quantenmechanisches System in einer Raumdimension bzw. ein quantenfeldtheoretisches in zwei Raum-Zeit-Dimensionen (aus diesem Grund wurden die Raumrichtungen des Ising-Gitters mit x und t bezeichnet, siehe u.a. Abb. 2.1). In [16] wird dies über die Analogie zum euklidischen Zeitentwicklungsoperator auf dem Gitter plausibel gemacht. Zur Verdeutlichung der Dimensionalität der einzelnen Systeme diene Anhang A.5.

Aufgrund der Aufspaltung von V in V^+ und V^- wird zudem definiert:

$$V^+ = \exp[-H^+], \quad V^- = \exp[-H^-]. \quad (2.68)$$

Nach (2.67) haben die Eigenwerte von V die Gestalt $\lambda_i = \exp[-E_i]$, wobei E_i die 2^L Eigenwerte zum Hamiltonoperator darstellen. Insbesondere wird wegen (2.68) nach E_+ und E_- unterschieden. Mit (2.59) und (2.60) lauten diese:

$$E_+ = -\frac{1}{2} (\pm \varepsilon_1 \pm \varepsilon_3 \pm \varepsilon_5 \pm \dots \pm \varepsilon_{2L-1}); \quad (2.69)$$

mit gerader Anzahl an Minuszeichen

$$E_- = -\frac{1}{2} (\pm \varepsilon_0 \pm \varepsilon_2 \pm \varepsilon_4 \pm \dots \pm \varepsilon_{2L-2}). \quad (2.70)$$

mit ungerader Anzahl an Minuszeichen

Der Grundzustand des Systems ist gegeben durch den kleinsten Energieeigenwert

$$E_{0+} = -\frac{1}{2} (+\varepsilon_1 + \varepsilon_3 + \varepsilon_5 + \dots + \varepsilon_{2L-1}). \quad (2.71)$$

Der Grundzustand ist dementsprechend symmetrisch.

Der erste angeregte Zustand für $\beta > 0,44$ hat die etwas höhere Energie

$$E_{0-} = -\frac{1}{2} (+|\varepsilon_0| + \varepsilon_2 + \varepsilon_4 + \dots + \varepsilon_{2L-2}) \quad (2.72)$$

und ist antisymmetrisch.

Deren Abstand definiert die Energieaufspaltung

$$\Delta E = E_{0-} - E_{0+}. \quad (2.73)$$

Im System mit endlich vielen Freiheitsgraden (L, T endlich) ist $\Delta E > 0$ und es gibt einen ausgezeichneten Grundzustand.

Im Limes unendlich vieler Freiheitsgrade $L \rightarrow \infty$ hingegen wird $\lim_{L \rightarrow \infty} \Delta E = 0$ wegen (2.66); damit existieren zwei entartete Grundzustände.

Entsprechendes ist aus Quantenfeldtheorien mit spontan gebrochener Symmetrie bekannt [10]. Dieser Vergleich manifestiert sich in der Universalitätshypothese.

2. Onsager-Lösung des zweidimensionalen Ising-Modells
nach Kaufman

these [14]. Im Speziellen befinden sich die ϕ^4 -Theorie in zwei Raum-Zeit-Dimensionen und das zweidimensionale Ising-Modell in derselben Universalitätsklasse [10, 22] (dort wird auf die Universalität in höheren Dimensionen eingegangen; nach [14] kann auf diese in zwei Dimensionen geschlossen werden).

Das Ziel der vorliegenden Arbeit besteht darin, einen analytischen Ausdruck für die Energieaufspaltung bei großen L im Ising-Modell zu finden.

Das Energieschema lässt sich graphisch veranschaulichen. Zu diesem Zweck wird $E_i - E_{0+}$, gleichbedeutend mit $\ln(\lambda_{max}/\lambda_i)$, aufgetragen:

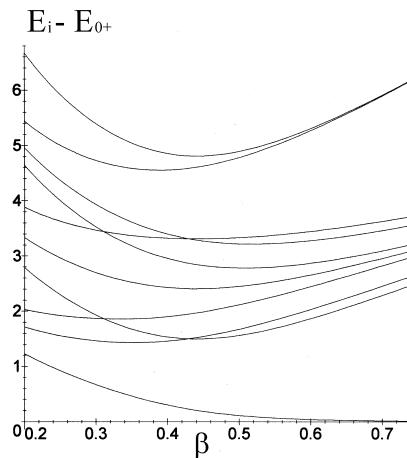


Abbildung 2.15: $L = 4$

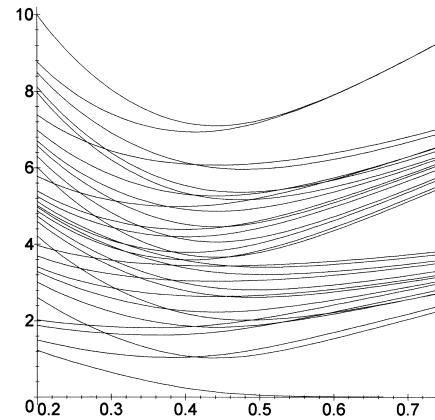


Abbildung 2.16: $L = 6$

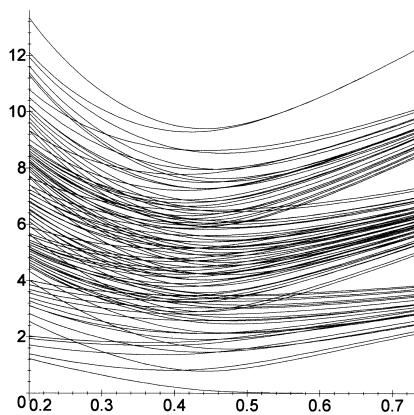


Abbildung 2.17: $L = 8$

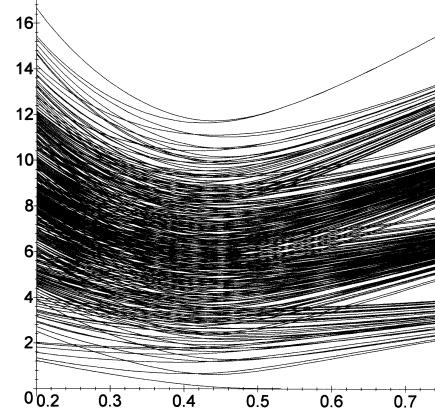


Abbildung 2.18: $L = 10$

Der Grundzustand liegt in dieser Darstellung jeweils auf der Abszisse.

Die dargestellten höheren Energien können unter Beachtung der erlaubten Vorzeichenkombinationen und des Vorzeichens von ε_0 folgendermaßen erzeugt werden:

- im Bereich $\beta < \beta_C$

$$E_{1-; k} = E_{0-} + \varepsilon_k, \quad k \text{ gerade}; \quad (2.74)$$

$$E_{2+; k, l} = E_{0+} + \varepsilon_k + \varepsilon_l, \quad k \neq l \text{ ungerade}; \quad (2.75)$$

- im Bereich $\beta > \beta_C$

$$E_{2-; k, l} = E_{0-} + |\varepsilon_k| + |\varepsilon_l|, \quad k \neq l \text{ gerade}; \quad (2.76)$$

$$E_{2+; k, l} = E_{0+} + \varepsilon_k + \varepsilon_l, \quad k \neq l \text{ ungerade}; \quad (2.77)$$

usw. $E_{n\pm; k_1, \dots, k_n}$.

Dies legt eine Teilcheninterpretation nahe, die in Kapitel 4 durch die fermionische Darstellung bestätigt wird, die zu denselben Ergebnissen führt.

Insbesondere lassen sich die deutlich sichtbaren Bandstrukturen als unterschiedliche Mehrteilchen-Anregungen erklären.

2.3 Die Zustandssumme

Mit den Eigenwerten λ_i von V ergibt sich nach (2.42) bzw. (2.11)

$$Z' = \sum_{i=1}^{2^L} (\lambda_i)^T. \quad (2.78)$$

Explizit ausgeschrieben lautet die Zustandssumme mit (2.59) und (2.60):

$$\begin{aligned} Z' = & \sum_{\{\text{gerade}\}} \exp \left[\frac{T}{2} (\pm \varepsilon_1 \pm \varepsilon_3 \pm \varepsilon_5 \pm \dots \pm \varepsilon_{2L-1}) \right] \\ & + \sum_{\{\text{ungerade}\}} \exp \left[\frac{T}{2} (\pm \varepsilon_0 \pm \varepsilon_2 \pm \varepsilon_4 \pm \dots \pm \varepsilon_{2L-2}) \right]. \end{aligned} \quad (2.79)$$

Mit den leicht zu verifizierenden Identitäten

$$\begin{aligned} & \sum_{\{\text{gerade}\}} \exp \left[\frac{T}{2} (\pm \varepsilon_1 \pm \varepsilon_3 \pm \varepsilon_5 \pm \dots \pm \varepsilon_{2L-1}) \right] \\ & = \frac{1}{2} \left\{ \prod_{r=0}^{L-1} 2 \cosh \left(\frac{T}{2} \varepsilon_{2r+1} \right) + \prod_{r=0}^{L-1} 2 \sinh \left(\frac{T}{2} \varepsilon_{2r+1} \right) \right\}, \end{aligned} \quad (2.80)$$

$$\begin{aligned} & \sum_{\{\text{ungerade}\}} \exp \left[\frac{T}{2} (\pm \varepsilon_0 \pm \varepsilon_2 \pm \varepsilon_4 \pm \dots \pm \varepsilon_{2L-2}) \right] \\ & = \frac{1}{2} \left\{ \prod_{r=0}^{L-1} 2 \cosh \left(\frac{T}{2} \varepsilon_{2r} \right) - \prod_{r=0}^{L-1} 2 \sinh \left(\frac{T}{2} \varepsilon_{2r} \right) \right\} \end{aligned} \quad (2.81)$$

ergibt sich eine kompaktere Schreibweise:

$$\begin{aligned} Z' &= \frac{1}{2} \left\{ \prod_{r=0}^{L-1} 2 \cosh \left(\frac{T}{2} \varepsilon_{2r+1} \right) + \prod_{r=0}^{L-1} 2 \sinh \left(\frac{T}{2} \varepsilon_{2r+1} \right) \right. \\ &\quad \left. + \prod_{r=0}^{L-1} 2 \cosh \left(\frac{T}{2} \varepsilon_{2r} \right) - \prod_{r=0}^{L-1} 2 \sinh \left(\frac{T}{2} \varepsilon_{2r} \right) \right\}. \end{aligned} \quad (2.82)$$

2.4 Thermodynamischer Limes und Phasenübergang

Bekanntlich treten in endlichen Systemen keine Phasenübergänge auf. Um sie zu beobachten, muß man den thermodynamischen Limes ausführen, der im vorliegenden Fall durch $L, T \rightarrow \infty$ gegeben ist.

Die Zustandssumme Z' (2.78) läßt sich folgendermaßen abschätzen:

$$(\lambda_{max})^T \leq Z' \leq 2^L (\lambda_{max})^T.$$

Die Freie Energie pro Spin $F \propto \frac{1}{LT} \ln Z'$ kann damit wegen

$$\frac{1}{L} \ln (\lambda_{max}) \leq \frac{1}{LT} \ln Z' \leq \frac{1}{L} \ln (\lambda_{max}) + \frac{1}{T} \ln 2$$

im Limes über λ_{max} ausgedrückt werden:

$$\lim_{L,T \rightarrow \infty} \frac{1}{LT} \ln Z' = \lim_{L \rightarrow \infty} \frac{1}{L} \ln (\lambda_{max}).$$

Letzterer Limes existiert, da λ_{max} (2.64) von der Ordnung e^L ist.

Die explizite Berechnung von $\lim_{L \rightarrow \infty} \frac{1}{L} \ln (\lambda_{max})$ führt schließlich auf die thermodynamischen Funktionen. Da diese nicht Thema der vorliegenden Arbeit sind, sei nur kurz vermerkt, daß die spezifische Wärmekapazität ein vollständiges elliptisches Integral erster Gattung enthält [32], welches eine Singularität aufweist [59]. Physikalisch bedeutet dies, daß es sich um einen Phasenübergang zweiter Ordnung handelt, was durch weitere Hinweise gestützt wird; hierzu ist insbesondere die Berechnung der spontanen Magnetisierung von Yang [33] zu nennen. Der kritische Punkt ergibt sich aus

$$\sinh (2\beta_C) = 1, \quad (2.83)$$

was auf den numerischen Wert [32]

$$\beta_C = 0,4406868 \quad \text{bzw.} \quad \frac{k_B}{J} \tilde{T}_C = 2,269185 \quad (2.84)$$

führt (siehe auch [6]).

Aufgrund der Dualität gilt (2.49), so daß aus (2.83)

$$\sinh (2\tilde{\beta}_C) = 1$$

und damit

$$\beta_C = \tilde{\beta}_C \quad (2.85)$$

folgt.

Kapitel 3

Einbau antiperiodischer Randbedingungen in zwei verschiedenen Darstellungen

In diesem Kapitel wird explizit vorgeführt, welchen Einfluß die Ersetzung periodischer Randbedingungen (RB) durch antiperiodische auf Eigenwerte und Zustandssummen hat. Entsprechend den Anordnungsmöglichkeiten von gemischten periodischen und antiperiodischen RB werden vier verschiedene Sektoren auftreten. Für diese findet man jeweils zwei (äquivalente, wie in Abschnitt 4.5 gezeigt wird) Darstellungen, je nachdem in welche Richtung die Transfermatrix propagiert. Bisher war dies die t -Richtung, weshalb diese Vorgehensweise, Darstellung I genannt, zuerst behandelt wird.

3.1 Darstellung I: In t -Richtung propagierende Transfermatrix

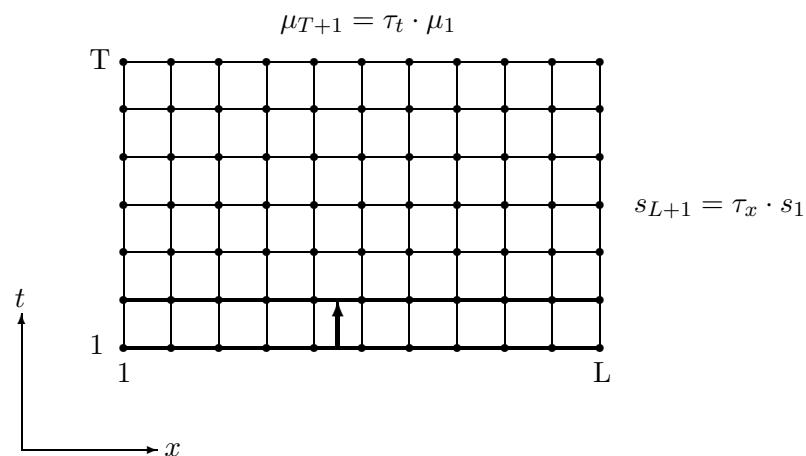


Abbildung 3.1: Transfermatrix in t -Richtung mit RB

Die verschiedenen Randbedingungen sind gegeben durch

$$s_{L+1} = \tau_x \cdot s_1, \quad \mu_{T+1} = \tau_t \cdot \mu_1 \quad \text{mit } \tau_x, \tau_t \in \{-1, +1\}. \quad (3.1)$$

Der Fall periodischer RB $\tau_x = +1, \tau_t = +1$ ist bereits ausführlich in Kapitel 2 beschrieben worden.

3.1.1 Antiperiodische RB in x -Richtung

Dies entspricht der Situation

$$\tau_x = -1, \quad \tau_t = +1. \quad (3.2)$$

Ausgehend von Kapitel 2 werden die dortigen Rechnungen nun entsprechend modifiziert.

Aufgrund von (3.2) erfährt der Wechselwirkungsterm (2.2) eine Vorzeichenänderung im letzten Summanden:

$$\mathcal{H}(\mu_t) = - \sum_{k=1}^{L-1} s_k s_{k+1} + s_L s_1. \quad (3.3)$$

Dies bedeutet, daß anstatt (2.14) nun abgewandelte Matrixelemente

$$\langle s_1, \dots, s_L | V_2^{ap} | s'_1, \dots, s'_L \rangle = \delta_{s_1 s'_1} \dots \delta_{s_L s'_L} \prod_{k=1}^{L-1} \exp[\beta s_k s_{k+1}] \exp[-\beta s_L s_1]$$

aufreten, was statt (2.19) in

$$V_2^{ap} = \prod_{\alpha=1}^{L-1} \exp[\beta \sigma_\alpha^z \sigma_{\alpha+1}^z] \exp[-\beta \sigma_L^z \sigma_1^z] \quad (3.4)$$

resultiert. Die antiperiodischen RB gehen also direkt in die Transfermatrix ein. V_1 (2.17) bleibt hingegen unverändert, da es die Wechselwirkung in t -Richtung (2.3) beschreibt, in der die RB nach (3.2) weiterhin periodisch ist. Formuliert man V_2^{ap} als Spindarstellung, so folgt anstatt (2.34) wegen (2.31):

$$V_2^{ap} = \exp[-i\beta U \Gamma_1 \Gamma_{2L}] \prod_{\alpha=1}^{L-1} \exp[-i\beta \Gamma_{2\alpha+1} \Gamma_{2\alpha}]. \quad (3.5)$$

Analog zu (2.22) wird

$$V^{ap} = V_2^{ap} \cdot V_1$$

definiert, was mit (3.5) und (2.33)

$$V^{ap} = \exp[-i\beta U \Gamma_1 \Gamma_{2L}] \prod_{\alpha=1}^{L-1} \exp[-i\beta \Gamma_{2\alpha+1} \Gamma_{2\alpha}] \prod_{\lambda=1}^L \exp[-i\tilde{\beta} \Gamma_{2\lambda} \Gamma_{2\lambda-1}] \quad (3.6)$$

ergibt.

Der einzige Unterschied zwischen V (siehe (2.34)) und V^{ap} (3.6) liegt in dem Vorzeichen des Faktors $\exp[\pm i\beta U \Gamma_1 \Gamma_{2L}]$.

Für $\exp[-i\beta U \Gamma_1 \Gamma_{2L}]$ in (3.6) erhält man im Gegensatz zu (2.35) in einer analogen Rechnung:

$$\begin{aligned} \exp[-i\beta U \Gamma_1 \Gamma_{2L}] &= \cosh \beta - iU \Gamma_1 \Gamma_{2L} \sinh \beta \\ &= \underbrace{\left[\frac{1}{2}(1+U) + \frac{1}{2}(1-U) \right]}_{=1} [\cosh \beta - iU \Gamma_1 \Gamma_{2L} \sinh \beta] \\ &= \frac{1}{2}(1+U) [\cosh \beta - i\Gamma_1 \Gamma_{2L} \sinh \beta] + \frac{1}{2}(1-U) [\cosh \beta + i\Gamma_1 \Gamma_{2L} \sinh \beta] \\ &= \frac{1}{2}(1+U) \exp[-i\beta \Gamma_1 \Gamma_{2L}] + \frac{1}{2}(1-U) \exp[i\beta \Gamma_1 \Gamma_{2L}]. \end{aligned}$$

Dies bewirkt eine zu (2.36) veränderte Aufspaltung:

$$V^{ap} = \frac{1}{2}(1+U) V^- + \frac{1}{2}(1-U) V^+ \quad (3.7)$$

$$\text{mit } V^\pm = \exp[\pm i\beta \Gamma_1 \Gamma_{2L}] \prod_{\alpha=1}^{L-1} \exp[-i\beta \Gamma_{2\alpha+1} \Gamma_{2\alpha}] \prod_{\lambda=1}^L \exp[-i\tilde{\beta} \Gamma_{2\lambda} \Gamma_{2\lambda-1}].$$

V^\pm sind mit denen aus Kapitel 2 (2.37) identisch. Dementsprechend bleiben auch die Eigenwerte von V^+ (2.47) und V^- (2.48) dieselben.

Die Eigenwerte von V^{ap} hingegen unterscheiden sich von denen von V (2.59), (2.60), da die Rolle der Projektoren in (3.7) gegenüber (2.36) vertauscht ist. Demzufolge wechselt auch die Zuordnung symmetrischer und antisymmetrischer Eigenvektoren. Nach Abschnitt 2.2.9 ergeben sich folgende erlaubte Vorzeichenkombinationen:

$$\exp\left[\frac{1}{2}(\pm\varepsilon_1 \pm \varepsilon_3 \pm \varepsilon_5 \pm \dots \pm \varepsilon_{2L-1})\right] \quad \text{aus } V^+; \quad (3.8)$$

mit ungerader Anzahl an Minuszeichen

$$\exp\left[\frac{1}{2}(\pm\varepsilon_0 \pm \varepsilon_2 \pm \varepsilon_4 \pm \dots \pm \varepsilon_{2L-2})\right] \quad \text{aus } V^- . \quad (3.9)$$

mit gerader Anzahl an Minuszeichen

Die zugehörige Zustandssumme ist gegeben durch

$$Z'^{ap} = \text{Sp}\left[(V^{ap})^T\right] \quad (3.10)$$

und wird in Abschnitt 3.1.3 aufgestellt.

3.1.2 Antiperiodische RB in t -Richtung

Dies ist der Fall (siehe Abb. 3.1)

$$\tau_x = +1, \quad \tau_t = -1. \quad (3.11)$$

Explizit ausgeschrieben bedeutet $\mu_{T+1} = -\mu_1$ die Umkehr aller Spins in einer Zeile:

$$\{s_1, s_2, \dots, s_L\}_{(T+1)-teZeile} \stackrel{!}{=} \{-s_1, -s_2, \dots, -s_L\}_{1-teZeile}.$$

Im Transfermatrixformalismus schrieb sich die Zustandssumme allgemein (2.9):

$$Z = \sum_{\mu_1} \dots \sum_{\mu_T} \langle \mu_1 | \mathcal{P} | \mu_2 \rangle \langle \mu_2 | \mathcal{P} | \mu_3 \rangle \dots \langle \mu_T | \mathcal{P} | \mu_{T+1} \rangle.$$

Im letzten Matrixelement findet aufgrund von (3.11) die Spinumkehr statt. Diese wird über einen Operator A_{ap} ausgeführt, so daß gilt:

$$\langle \mu_T | \mathcal{P} | \mu_{T+1} \rangle = \langle \mu_T | \mathcal{P} A_{ap} | \mu_1 \rangle.$$

Damit ist

$$Z_{ap} = \text{Sp}(\mathcal{P}^T A_{ap}). \quad (3.12)$$

Im Gegensatz zum vorigen Abschnitt 3.1.1 werden die antiperiodischen RB nicht in die Transfermatrix, sondern über einen Operator in die Spurbildung eingebaut.

Die explizite Form des Spin-Umkehr-Operators A_{ap} erhält man durch folgende Überlegung: Im eindimensionalen Ising-Modell lassen sich bei entsprechend gewählter Darstellung wie in (A.7) die Zustände eines Spins $s_i = \pm 1$ durch die Basisvektoren

$$|s_i = +1\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \quad \text{und} \quad |s_i = -1\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \quad (3.13)$$

repräsentieren (s. [45] und A.1). Diese können die durch die 2×2 -Transfermatrix (A.7) beschriebenen Konfigurationen benachbarter Spins abfragen. Der Wechsel zwischen den beiden Zuständen gelingt mittels der Paulimatrix σ^x (2.20):

$$\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \quad \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}.$$

Im zweidimensionalen Ising-Modell können in der hier gewählten Darstellung (2.17), (2.19) die Basisvektoren (3.13) weiterhin verwendet werden; allerdings treten anstelle von einfachen 2×2 -Matrizen L -fache direkte Produkte von ihnen auf (siehe A.5). Die in der Transfermatrix enthaltenen Konfigurationen können mittels der Definition (2.16) entnommen werden, nach der die Elemente der L beteiligten 2×2 -Matrizen jeweils über ihre 2-komponentigen Basisvektoren (3.13) berechnet werden.

Eine Umkehr der L Spins in einer Zeile geschieht daher (gemäß den Rechenregeln aus 2.2.2) durch Multiplikation mit dem L -fachen direkten Produkt der Paulimatrix σ^x (siehe auch A.5):

$$A_{ap} = \sigma^x \times \sigma^x \times \dots \times \sigma^x = \sigma_1^x \sigma_2^x \dots \sigma_L^x. \quad (3.14)$$

Dies war aber gerade der Operator U (2.32):

$$A_{ap} = U. \quad (3.15)$$

Dies erlaubt eine Veranschaulichung der Symmetrie U , nach der die Eigenvektoren unterschieden wurden (siehe Abschnitt 2.2.7): Beziiglich einer Spinumkehr treten symmetrische (2.40) und antisymmetrische (2.41) Zustände auf.

Mit (3.15) lautet die Zustandssumme (3.12):

$$Z_{ap} = \text{Sp}(\mathcal{P}^T U). \quad (3.16)$$

Da U mit \mathcal{P} vertauscht, kann die Diagonalisierung in derselben Basis wie bisher erfolgen. Die endgültige Form der Zustandssumme ist dem nächsten Abschnitt zu entnehmen.

3.1.3 Sektoren

Entsprechend den RB (3.1) treten insgesamt vier Sektoren auf. Die zugehörigen Zustandssummen werden mit $Z_{\tau_x \tau_t}$ indiziert. Tabelle 3.1 gibt eine Übersicht.

Sektor	Z	τ_x	τ_t	RB in x -Richtung	RB in t -Richtung
++	Z_{++}	+1	+1	periodisch	periodisch
+-	Z_{+-}	+1	-1	periodisch	antiperiodisch
-+	Z_{-+}	-1	+1	antiperiodisch	periodisch
--	Z_{--}	-1	-1	antiperiodisch	antiperiodisch

Tabelle 3.1: Überblick der Sektoren

Der Übersichtlichkeit wegen wird definiert:

$$\mathcal{E}_\alpha^\delta = -\frac{1}{2} \sum_k (\pm \varepsilon_k), \quad k = 0, 1, \dots, 2L-1 \quad (3.17)$$

$$\text{mit } \alpha = \begin{cases} +1 & \text{für gerade Anzahl an Minuszeichen,} \\ -1 & \text{für ungerade Anzahl an Minuszeichen} \end{cases} \quad (3.18)$$

$$\text{und } \delta = \begin{cases} +1 & \text{für } k \text{ gerade,} \\ -1 & \text{für } k \text{ ungerade.} \end{cases} \quad (3.19)$$

(3.17) deckt sämtliche Möglichkeiten auftretender Energieniveaus ab. Für $\alpha = +1$ gehören sie zu symmetrischen Eigenvektoren, für $\alpha = -1$ zu antisymmetrischen (Kapitel 2). Bei $\delta = +1$ entstammen sie H^- , bei $\delta = -1$ H^+ (2.68). Des Weiteren wird definiert:

$$Y_\alpha^\delta = \sum_j \exp \left[-\mathcal{E}_{\alpha,j}^\delta \cdot T \right]. \quad (3.20)$$

Die Summation in (3.20) verläuft über alle verschiedenen in $\mathcal{E}_\alpha^\delta$ enthaltenen 2^{L-1} Energieniveaus.

Mit diesen Vorüberlegungen lassen sich nun die Zustandssummen aus Tabelle 3.1 aufstellen.

- Z_{++}

Unter Verwendung von (3.20) folgt aus (2.44):

$$\begin{aligned} Z'_{++} &= \operatorname{Sp} \left[\frac{1}{2} (1+U) (V^+)^T \right] + \operatorname{Sp} \left[\frac{1}{2} (1-U) (V^-)^T \right] \\ &= Y_+^- + Y_-^+. \end{aligned} \quad (3.21)$$

Dies ist das aus Kapitel 2 bekannte Ergebnis (2.79).

Mit (2.80) und (2.81) ergab sich die kompaktere Darstellung (2.82):

$$\begin{aligned} Z'_{++} &= \frac{1}{2} \left\{ + \prod_{r=0}^{L-1} 2 \cosh \left(\frac{T}{2} \varepsilon_{2r+1} \right) + \prod_{r=0}^{L-1} 2 \sinh \left(\frac{T}{2} \varepsilon_{2r+1} \right) \right. \\ &\quad \left. + \prod_{r=0}^{L-1} 2 \cosh \left(\frac{T}{2} \varepsilon_{2r} \right) - \prod_{r=0}^{L-1} 2 \sinh \left(\frac{T}{2} \varepsilon_{2r} \right) \right\}. \end{aligned} \quad (3.22)$$

- Z_{+-}

Aus (3.12) in Abschnitt 3.1.2 ergibt sich mit $U^2 = 1$

$$\begin{aligned} Z'_{+-} &= \operatorname{Sp} \left[\frac{1}{2} (1+U) U (V^+)^T \right] + \operatorname{Sp} \left[\frac{1}{2} (1-U) U (V^-)^T \right] \\ &= \operatorname{Sp} \left[\frac{1}{2} (1+U) (V^+)^T \right] - \operatorname{Sp} \left[\frac{1}{2} (1-U) (V^-)^T \right] \\ &= Y_+^- - Y_-^+. \end{aligned} \quad (3.23)$$

Dementsprechend erhält man:

$$\begin{aligned} Z'_{+-} &= \frac{1}{2} \left\{ + \prod_{r=0}^{L-1} 2 \cosh \left(\frac{T}{2} \varepsilon_{2r+1} \right) + \prod_{r=0}^{L-1} 2 \sinh \left(\frac{T}{2} \varepsilon_{2r+1} \right) \right. \\ &\quad \left. - \prod_{r=0}^{L-1} 2 \cosh \left(\frac{T}{2} \varepsilon_{2r} \right) + \prod_{r=0}^{L-1} 2 \sinh \left(\frac{T}{2} \varepsilon_{2r} \right) \right\}. \end{aligned} \quad (3.24)$$

• Z_{-+}

Mit (3.7) und (3.10) aus Abschnitt 3.1.1 ergibt sich

$$\begin{aligned} Z'_{-+} &= \text{Sp} \left[\frac{1}{2} (1 - U) (V^+)^T \right] + \text{Sp} \left[\frac{1}{2} (1 + U) (V^-)^T \right] \\ &= Y_-^- + Y_+^+ \end{aligned} \quad (3.25)$$

sowie mit zu (2.80) und (2.81) analogen Identitäten:

$$\begin{aligned} Z'_{-+} &= \frac{1}{2} \left\{ + \prod_{r=0}^{L-1} 2 \cosh \left(\frac{T}{2} \varepsilon_{2r+1} \right) - \prod_{r=0}^{L-1} 2 \sinh \left(\frac{T}{2} \varepsilon_{2r+1} \right) \right. \\ &\quad \left. + \prod_{r=0}^{L-1} 2 \cosh \left(\frac{T}{2} \varepsilon_{2r} \right) + \prod_{r=0}^{L-1} 2 \sinh \left(\frac{T}{2} \varepsilon_{2r} \right) \right\}. \end{aligned} \quad (3.26)$$

• Z_{--}

In diesem Fall wird sowohl die Transfermatrix wie in (3.7) modifiziert als auch der Operator U wie in (3.12) in die Spur miteingebaut.

$$\begin{aligned} Z'_{--} &= \text{Sp} \left[\frac{1}{2} (1 - U) U (V^+)^T \right] + \text{Sp} \left[\frac{1}{2} (1 + U) U (V^-)^T \right] \\ &= - \text{Sp} \left[\frac{1}{2} (1 - U) (V^+)^T \right] + \text{Sp} \left[\frac{1}{2} (1 + U) (V^-)^T \right] \\ &= -Y_-^- + Y_+^+. \end{aligned} \quad (3.27)$$

Hierfür ergibt sich folgende kompakte Schreibweise:

$$\begin{aligned} Z'_{--} &= \frac{1}{2} \left\{ - \prod_{r=0}^{L-1} 2 \cosh \left(\frac{T}{2} \varepsilon_{2r+1} \right) + \prod_{r=0}^{L-1} 2 \sinh \left(\frac{T}{2} \varepsilon_{2r+1} \right) \right. \\ &\quad \left. + \prod_{r=0}^{L-1} 2 \cosh \left(\frac{T}{2} \varepsilon_{2r} \right) + \prod_{r=0}^{L-1} 2 \sinh \left(\frac{T}{2} \varepsilon_{2r} \right) \right\}. \end{aligned} \quad (3.28)$$

3.2 Alternative Darstellung II: In x -Richtung propagierende Transfermatrix

Grundlage bei der Berechnung der Zustandssummen war bisher (Kapitel 2 und 3.1) eine Transfermatrix, die auf den Zeilen definiert wurde und sich von Zeile zu Zeile durch das gesamte Ising-Gitter arbeitete. Diese Methode wurde als Darstellung I bezeichnet.

Alternativ ist es genauso zulässig, die Transfermatrix auf den Spalten zu definieren und sie auf diesen vorrücken zu lassen.

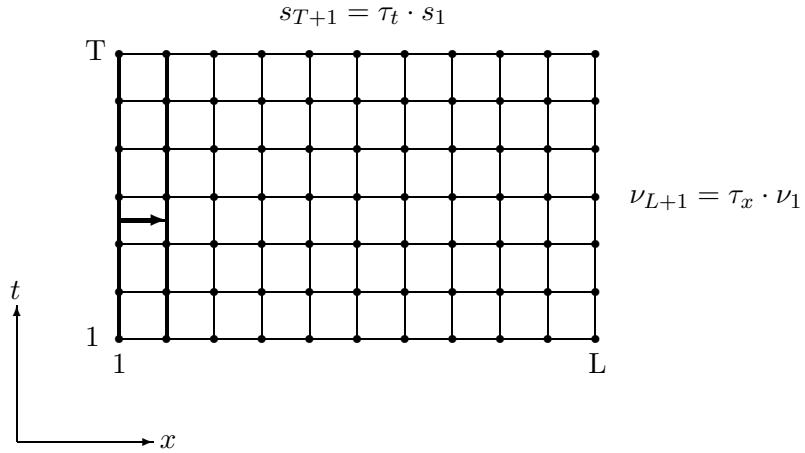


Abbildung 3.2: Transfermatrix in x -Richtung mit RB

Dies führt auf eine andere, Darstellung II genannte Form der Sektor-Zustandssummen, die jedoch der bisherigen äquivalent ist, wie in Abschnitt 4.5 bewiesen wird.

Da insbesondere die algebraischen Methoden aus 3.1.1 und 3.1.2 zum Einbau der antiperiodischen RB vertauschen, dient dies der Untermauerung der im vergangenen Abschnitt erzielten Ergebnisse.

Zur Unterscheidung werden die Größen der Darstellung II mit $\hat{\cdot}$ gekennzeichnet. Deren Aussehen lässt sich durch folgende Symmetrieverlegung aus der Darstellung I gewinnen:

Die Situation in Abb. 3.2 (Darstellung II) wird offensichtlich durch Vertauschung sowohl der Koordinatenachsen als auch von L und T auf diejenige in Abb. 3.1 (Darstellung I) überführt:

$$\begin{array}{ccc}
 L \leftrightarrow T & & \\
 \text{Darstellung II, Abb. 3.2} & \iff & \text{Darstellung I, Abb. 3.1} \\
 x \leftrightarrow t & &
 \end{array} \quad (3.29)$$

Mit einem $\hat{\cdot}$ versehene Größen aus Darstellung II sind daher im Folgenden stets so zu verstehen, daß sie gemäß (3.29) aus den in Darstellung I erfolgten Definitionen hervorgehen.

Auf Spalten definierte Größen $\hat{A}(L, T)$ erhält man dementsprechend aus auf

den Zeilen definierten Größen $A(T, L)$ unter Vertauschung von L und T .

Zur besseren Unterscheidung wird dabei die Spaltenvariable, die die Spinkonfiguration einer gesamten Spalte zusammenfaßt, mit

$$\nu_l = \{s_1, s_2, \dots, s_T\}_{l-teSpalte} .$$

bezeichnet (siehe Abb. 3.2).

Bei richtungsbezogenen Ausdrücken, wie es vor allem bei den Zustandssummen der Fall ist, ist zudem die Vertauschung $x \leftrightarrow t$ zu beachten.

Aus diesen Symmetriebetrachtungen folgt also insbesondere für die Zustandssummen $\hat{Z}_{\tau_x \tau_t}$ in Darstellung II:

$$\hat{Z}_{\tau_x \tau_t}(L, T) = Z_{\tau_t \tau_x}(T, L). \quad (3.30)$$

Diesen Zusammenhang erhält man auch durch explizite Konstruktion der $\hat{Z}_{\tau_x \tau_t}$ mit Darstellung II-Größen [persönliche Aufzeichnungen des Autors]; diese verläuft analog zum Vorgehen in Kapitel 2, wodurch keine neuen Aspekte auftreten, und weshalb hier dem eleganteren Symmetrieargument (3.29) der Vorzug gegeben wurde.

Zur Vervollständigung werden die verschiedenen Sektor-Zustandssummen nun explizit aufgeführt:

• \hat{Z}_{++}

Bei periodischen RB folgt aus (2.36) bzw. (3.21):

$$\begin{aligned} \hat{Z}'_{++} &= \text{Sp} \left[\hat{V}^L \right] \\ &= \text{Sp} \left[\frac{1}{2} (1 + \hat{U}) (\hat{V}^+)^L \right] + \text{Sp} \left[\frac{1}{2} (1 - \hat{U}) (\hat{V}^-)^L \right] \\ &= \hat{Y}_+^- + \hat{Y}_+^+. \end{aligned} \quad (3.31)$$

• \hat{Z}_{+-}

Senkrecht zur Propagationsrichtung der Transfermatrix sind die antiperiodischen RB in dieser selber in Form von \hat{V}^{ap} enthalten, vgl. (3.7) bzw. (3.25).

$$\begin{aligned} \hat{Z}'_{+-} &= \text{Sp} \left[(\hat{V}^{ap})^L \right] \\ &= \text{Sp} \left[\frac{1}{2} (1 - \hat{U}) (\hat{V}^+)^L \right] + \text{Sp} \left[\frac{1}{2} (1 + \hat{U}) (\hat{V}^-)^L \right] \\ &= \hat{Y}_-^- + \hat{Y}_-^+. \end{aligned} \quad (3.32)$$

- \hat{Z}_{-+}

In Richtung der Transfermatrix (hier gerade die x -Richtung) bewirkt der Spinumkehroperator \hat{U} antiperiodische RB (siehe (3.16) bzw. (3.23)):

$$\begin{aligned}
 \hat{Z}'_{-+} &= \text{Sp} \left[\hat{V}^L \hat{U} \right] \\
 &= \text{Sp} \left[\frac{1}{2} (1 + \hat{U}) (\hat{V}^+)^L \right] - \text{Sp} \left[\frac{1}{2} (1 - \hat{U}) (\hat{V}^-)^L \right] \\
 &= \hat{Y}_+^- - \hat{Y}_-^+. \tag{3.33}
 \end{aligned}$$

- \hat{Z}_{--}

Durch Kombination der oben aufgeführten Modifikationen erhält man analog zu (3.27)

$$\begin{aligned}
 \hat{Z}'_{--} &= \text{Sp} \left[(\hat{V}^{ap})^L \hat{U} \right] \\
 &= -\text{Sp} \left[\frac{1}{2} (1 - \hat{U}) (\hat{V}^+)^L \right] + \text{Sp} \left[\frac{1}{2} (1 + \hat{U}) (\hat{V}^-)^L \right] \\
 &= -\hat{Y}_-^- + \hat{Y}_+^+. \tag{3.34}
 \end{aligned}$$

Man erhält auch hier mittels zu (2.80), (2.81) analogen Identitäten kompakte Darstellungen wie in (3.22), (3.24), (3.26) und (3.28); an diesen bisherigen Ergebnissen können sie direkt nach (3.29) bzw. (3.30) abgelesen werden.

Da $Z_{\tau_x \tau_t}$ aus Darstellung I und $\hat{Z}_{\tau_x \tau_t}$ aus Darstellung II offensichtlich denselben physikalischen Sachverhalt beschreiben, sollten sie einander gleich sein. Dies zu beweisen, gelingt in Kapitel 4 anhand der fermionischen Sektoren.

3.3 Zusammenfassung und Vergleich der Methoden

Die verschiedenen Methoden zum Einbau antiperiodischer RB werden hier noch einmal schematisch zusammengefaßt. In den Zeichnungen stehen die Abkürzungen p für periodisch und ap für antiperiodisch.

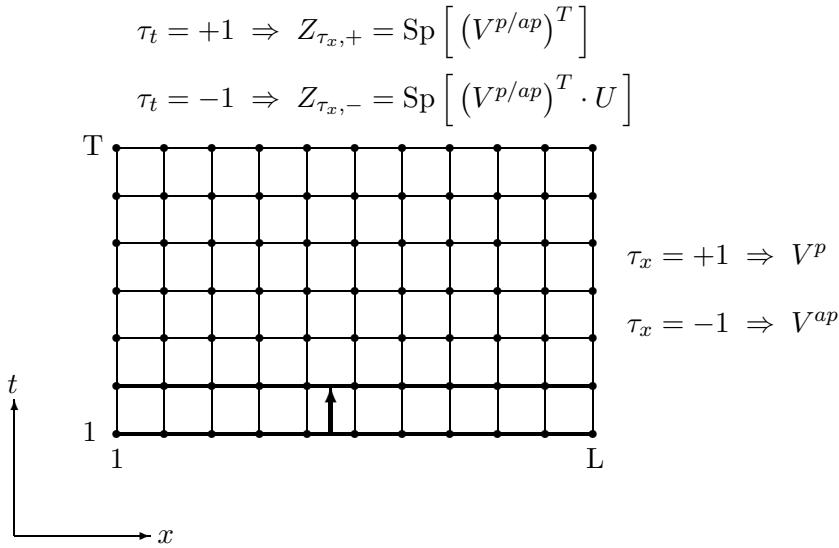


Abbildung 3.3: Einbau der RB in Darstellung I

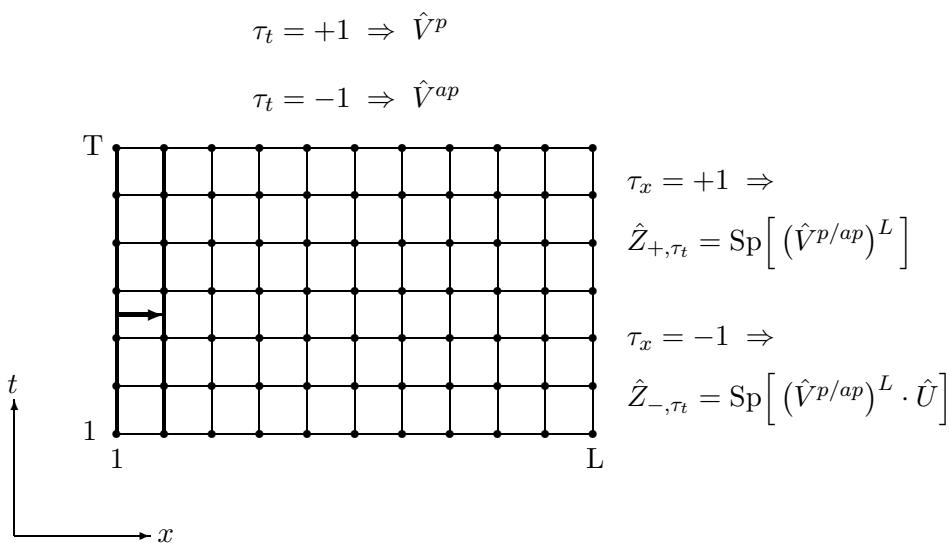


Abbildung 3.4: Einbau der RB in Darstellung II

*3. Einbau antiperiodischer Randbedingungen
in zwei verschiedenen Darstellungen*

Antiperiodische RB in Richtung der Transfermatrix werden durch den Einbau des Paritätsoperators U bzw. \hat{U} in die Spur realisiert. Senkrecht zur Propagationsrichtung gehen die antiperiodischen RB hingegen direkt in die Transfermatrix ein.

Da diese algebraischen Methoden zum Einbau einer antiperiodischen RB in vorgegebener Richtung beim Wechsel zwischen Darstellung I und II jeweils vertauschen (besonders deutlich bei den RB $\tau_x = +1, \tau_t = -1$ oder $\tau_x = -1, \tau_t = +1$), und in Kapitel 4.5 ein Äquivalenzbeweis von Darstellung I und II erfolgt, bestätigen sich diese Methoden gegenseitig und untermauern somit die dadurch erhaltenen Ergebnisse.

Kapitel 4

Fermionische Darstellung

1964 entwickelten Schultz, Mattis und Lieb eine weitere analytische Lösung des zweidimensionalen Ising-Modells [17] unter Verwendung fermionischer Operatoren. Sie enthält einige für die vorliegende Thematik interessante Aspekte. Insbesondere lassen sich rein algebraische Ausdrücke aus der Onsager-Kaufman-Lösung in der Fermion-Sprache veranschaulichen. Der nächste Abschnitt skizziert diesen Lösungsweg.

4.1 Die Lösung des zweidimensionalen Ising-Modells mittels fermionischer Operatoren

Grundlage ist auch hier der Formalismus der Transfermatrix, in dem sich die Zustandssumme als Spur über deren T -fache Potenz schreibt:

$$Z_{++} = \text{Sp}(\mathcal{P}^T) . \quad (4.1)$$

Für diese Form propagiere die Transfermatrix \mathcal{P} wie in Kapitel 2 und 3.1 entlang der t -Achse (siehe Abb. 2.4) unter der Annahme periodischer Randbedingungen ($\tau_x = +1$, $\tau_t = +1$), welche zuerst diskutiert werden; die Aufstellung der verschiedenen Sektor-Zustandssummen bei antiperiodischen Randbedingungen (Tab. 3.1) kann hier ebenfalls erfolgen und wird im Anschluß behandelt.

4.1.1 Alternative Formulierung der Transfermatrix

Ausgangspunkt ist die Transfermatrix

$$\mathcal{P} = [2 \sinh(2\beta)]^{\frac{L}{2}} \cdot V_2 \cdot V_1$$

(2.17)-(2.22), wie sie nach Onsager und Kaufman in Kapitel 2 formuliert wurde. Um diese für die nachfolgenden Zwecke geeignet umzuschreiben, wird zunächst eine Ähnlichkeitstransformation der Paulimatrizen durchgeführt, unter der ihre Eigenschaften bestehen bleiben:

$$\begin{aligned} \sigma_m^x &\rightarrow -\sigma_m^z \\ \sigma_m^y &\rightarrow \sigma_m^y \\ \sigma_m^z &\rightarrow \sigma_m^x . \end{aligned}$$

Nach dieser lauten V_1 (2.17) und V_2 (2.19):

$$V_1 = \exp \left[-\tilde{\beta} \sum_{m=1}^L \sigma_m^z \right]; \quad (4.2)$$

$$V_2 = \exp \left[\beta \sum_{m=1}^L \sigma_m^x \sigma_{m+1}^x \right] \quad \text{mit } \sigma_{L+1}^x = \sigma_1^x \text{ wegen (2.1).} \quad (4.3)$$

In dieser Darstellung ist offensichtlich V_1 diagonal (vgl. A.1), während dies für V_2 nicht mehr gilt. In der Beschreibung aus Kapitel 2 war dies genau umgekehrt. Man vergleiche hierzu einen entsprechenden Kommentar im Abschnitt „An Alternative Realization“ des Kaufman-Artikels [15].

Für eine verdeutlichende Matrix- und Vektor-Schreibweise werden im Folgenden vorübergehend die Größen ohne Indizes verwendet; der Übergang zu den indizierten Größen als direkte Produkte nach (2.21) wird im Anschluß wieder durchgeführt. Auftretende Matrizen werden dabei als Matrixdarstellungen für Operatoren aufgefaßt, so daß diese Begriffe synonym verwendet werden.

Die oben vorgenommene Ähnlichkeitstransformation $\sigma^i \rightarrow S \sigma^i S^{-1}$ gelingt über (vgl. [15])

$$S = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & -1 \\ 1 & 1 \end{pmatrix}. \quad (4.4)$$

Der dadurch bedingte Darstellungswechsel bewirkt folgendes verändertes Aussehen der Spinzustände $s_i = \pm 1$ („up“ und „down“, siehe (3.13)):

$$\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \rightarrow \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix}, \quad \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \rightarrow \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} -1 \\ +1 \end{pmatrix}. \quad (4.5)$$

Das Ziel dieser Transformation besteht darin, V_1 und V_2 durch Bilinearformen in neuen Operatoren σ^+ und σ^- auszudrücken, welche folgendermaßen eingeführt werden:

$$\sigma^+ = \frac{1}{2} (\sigma^x + i \sigma^y) = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}; \quad (4.6)$$

$$\sigma^- = \frac{1}{2} (\sigma^x - i \sigma^y) = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}. \quad (4.7)$$

Für deren Produkte ergibt sich

$$\sigma^+ \sigma^- = \frac{1}{2} (\mathbb{1} + \sigma^z) = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad (4.8)$$

$$\sigma^- \sigma^+ = \frac{1}{2} (\mathbb{1} - \sigma^z) = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}. \quad (4.9)$$

Angewandt auf die Zustände $\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$ und $\begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$, die sich nach dem Darstellungswechsel nun nicht mehr auf die Spinzustände beziehen (sondern durch deren Linearkombination darstellbar sind), offenbaren sich σ^+ und σ^- als Erzeuger und Vernichter:

$$\sigma^+ \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma^- \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}. \quad (4.10)$$

Aus (4.6)-(4.9) erhält man die Antikommutatorrelationen

$$\{\sigma^+, \sigma^-\} = 1, \quad (\sigma^+)^2 = (\sigma^-)^2 = 0. \quad (4.11)$$

Daraus wird ersichtlich, daß es sich bei σ^+ und σ^- um Fermion-Erzeuger und -Vernichter sowie um zugehörige Fermionzustände handelt:

$$\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \hat{=} \text{Fermion}, \quad \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \hat{=} \text{kein Fermion}. \quad (4.12)$$

Dies verdeutlicht den stattgefundenen Darstellungswechsel.

Beim Übergang zu den indizierten Größen $\sigma^\pm \rightarrow \sigma_m^\pm$ nach (2.21) muß genau auf die Vertauschungsrelationen achtgegeben werden:

Entfalten σ^+ und σ^- auf denselben Gitterplätzen ihre Wirkung, wie es oben der Fall war, erhält man die Antikommutatorrelationen

$$\{\sigma_m^+, \sigma_m^-\} = 1, \quad (\sigma_m^+)^2 = (\sigma_m^-)^2 = 0, \quad (4.13)$$

wie sie von *Fermionoperatoren* aus der zweiten Quantisierung im Operatorformalismus bekannt sind.

Operationen an unterschiedlichen Gitterpunkten m, n hingegen sind jedoch unabhängig voneinander; dies führt auf die Kommutatorrelationen

$$[\sigma_m^\pm, \sigma_n^\pm] = 0 \quad \text{für } m \neq n, \quad (4.14)$$

wie sie von *bosonischen Operatoren* her vertraut sind.

Die neuen Operatoren σ_m^+ und σ_m^- sind also offensichtlich *teilweise bosonischer und teilweise fermionischer Natur*. Der Umgang mit diesen gemischten Relationen wird im nächsten Abschnitt aufgezeigt.

Für den weiteren Verlauf verbleibt festzuhalten, daß sich die in V_1 (4.2) und V_2 (4.3) enthaltenen Paulimatrizen folgendermaßen über $\sigma_m^\pm = \frac{1}{2}(\sigma_m^x \pm i\sigma_m^y)$ ausdrücken lassen:

$$\begin{aligned} \sigma_m^z &= 2(\sigma_m^+ \sigma_m^- - \frac{1}{2}), \\ \sigma_m^x &= \sigma_m^+ + \sigma_m^-. \end{aligned}$$

Damit lassen sich V_1 (4.2) und V_2 (4.3) bilinear in σ_m^\pm formulieren:

$$V_1 = \exp \left[-2\tilde{\beta} \sum_{m=1}^L \left(\sigma_m^+ \sigma_m^- - \frac{1}{2} \right) \right], \quad (4.15)$$

$$V_2 = \exp \left[\beta \sum_{m=1}^L (\sigma_m^+ + \sigma_m^-) (\sigma_{m+1}^+ + \sigma_{m+1}^-) \right] \quad (4.16)$$

$$\begin{aligned} &= \exp \left[\beta \left\{ \sum_{m=1}^{L-1} (\sigma_m^+ + \sigma_m^-) (\sigma_{m+1}^+ + \sigma_{m+1}^-) \right. \right. \\ &\quad \left. \left. + (\sigma_L^+ + \sigma_L^-) (\sigma_1^+ + \sigma_1^-) \right\} \right]. \end{aligned} \quad (4.17)$$

V_1 beschreibt weiterhin die Kopplung in t -Richtung und V_2 diejenige in x -Richtung.

In (4.17) ist der in (4.16) durch die periodischen Spin-Randbedingungen enthaltene Randterm ausgeschrieben. Dieser wird noch eine Rolle spielen.

Zusammengefaßt formulieren Schultz, Mattis und Lieb die aus der Onsager-Kaufman-Lösung bekannte Transfermatrix alternativ über Erzeuger σ_m^+ und Vernichter σ_m^- , die gemischt fermionischen und bosonischen Vertauschungsrelationen gehorchen.

Übrigens erwähnen Schultz, Mattis und Lieb den beschriebenen Darstellungswechsel nur am Rande und widmen sich hauptsächlich einer Herleitung der Transfermatrix über eine Rekursionsformel für reduzierte Dichtematrizen [17], die auf dasselbe Ergebnis führt. Der Variante mit dem Darstellungswechsel wurde hier der Vorzug gegeben, um den Bezug zur Onsager-Kaufman-Lösung deutlicher herauszustellen [46].

4.1.2 Transformation auf reine Fermion-Operatoren

Wie bereits im vorangehenden Abschnitt festgestellt wurde, sind die Erzeuger σ_m^+ und Vernichter σ_m^- teils bosonischen und teils fermionischen Charakters:

$$\begin{aligned} [\sigma_m^\pm, \sigma_n^\pm] &= 0 \quad \text{für } m \neq n : \quad \text{bosonisch} \\ \{\sigma_m^+, \sigma_m^-\} &= 1, \quad (\sigma_m^+)^2 = (\sigma_m^-)^2 = 0 : \quad \text{fermionisch} \end{aligned}$$

Da die Invarianz dieser gemischten Relationen bei Transformationen schnell verletzt wird, erscheint eine Diagonalisierung zunächst schwer durchführbar. Den Ausweg bietet eine Transformation auf neue Operatoren C_m, C_m^\dagger :

$$C_m = \exp \left[\pi i \sum_{j=1}^{m-1} \sigma_j^+ \sigma_j^- \right] \sigma_m^-, \quad (4.18)$$

$$C_m^\dagger = \exp \left[\pi i \sum_{j=1}^{m-1} \sigma_j^+ \sigma_j^- \right] \sigma_m^+. \quad (4.19)$$

Bei C_m und C_m^\dagger handelt es sich dann um *rein fermionische Operatoren*, die dem kompletten Satz an Antikommatorregeln

$$\{C_i, C_j^\dagger\} = \delta_{ij}, \quad \{C_i, C_j\} = \{C_i^\dagger, C_j^\dagger\} = 0 \quad (4.20)$$

gehorchen, wie man durch Nachrechnen zeigen kann.

Die Transformation (4.18), (4.19) geht zurück auf Jordan und Wigner und taucht bereits in ihrem Klassiker über die zweite Quantisierung von Fermionfeldern aus dem Jahre 1928 auf [18]. Schultz, Mattis und Lieb verwenden diese Transformation des Häufigeren [47, 48, 49]; eine gute Beschreibung zu dieser findet man besonders in [47].

Diese Jordan-Wigner-Transformation (4.18), (4.19) kann noch unter einem anderen Aspekt beleuchtet werden. Hierzu beachte man zunächst, daß aus der Relation $\exp(\theta A) = \cosh(\theta) + A \sinh(\theta)$ für Matrizen A mit $A^2 = 1$ (und $\theta \in \mathbb{C}$) folgt (siehe auch A.4):

$$\exp \left[i \pi \sigma_j^+ \sigma_j^- \right] \stackrel{(4.8)}{=} -\sigma_j^z. \quad (4.21)$$

Da die Summanden im Exponenten kommutieren, können C_m und C_m^\dagger damit in Produkte umgewandelt werden:

$$C_m = \prod_{j=1}^{m-1} (-\sigma_j^z) \sigma_m^-; \quad (4.22)$$

$$C_m^\dagger = \prod_{j=1}^{m-1} (-\sigma_j^z) \sigma_m^+. \quad (4.23)$$

Über den Vergleich mit den (transformierten) Γ -Matrizen (2.30) wird übrigens der immer noch bestehende Bezug zur Kaufman-Darstellung deutlich (vgl. [19]):

$$C_m = \frac{1}{2} (\Gamma_{2m-1} - i \Gamma_{2m}) \quad (4.24)$$

$$C_m^\dagger = \frac{1}{2} (\Gamma_{2m-1} + i \Gamma_{2m}) \quad (4.25)$$

Aufgrund des Darstellungswechsels $\sigma_j^x \rightarrow -\sigma_j^z$ bewirkt nun $-\sigma_j^z$ die Spinekehr am Gitterplatz j , wovon man sich mit Hilfe der Zustände (4.5) überzeugen kann; der Spinekehroperator U für die gesamte Zeile (siehe (3.14), (3.15)) lautet demzufolge

$$U = \prod_{j=1}^L (-\sigma_j^z). \quad (4.26)$$

Bei C_m (4.22) und C_m^\dagger (4.23) hingegen findet offensichtlich eine Umkehr nur der ersten $m-1$ Spins (innerhalb einer Zeile) statt:

$$C_m = U_{m-1} \sigma_m^-; \quad (4.27)$$

$$C_m^\dagger = U_{m-1} \sigma_m^+; \quad (4.28)$$

$$\text{mit } U_{m-1} |s_1, \dots, s_L\rangle = | -s_1, \dots, -s_{m-1}, s_m, \dots, s_L\rangle. \quad (4.29)$$

Das herkömmliche U (3.14), das alle Spins in einer Zeile umdreht, ist in dieser Notation als

$$U = U_L$$

zu verstehen.

Die Erzeugung bzw. Vernichtung eines Fermions am Gitterplatz m bewirkt nach (4.27), (4.28) also offenbar einen Kink der Spins an eben dieser Stelle (veranschaulicht in Abb. 6.1). Der sich dadurch aufdrängende Zusammenhang mit einer Grenzfläche senkrecht zur x -Richtung wird in Kapitel 6 aufgegriffen.

Aus den Transformationsregeln (4.18) und (4.19) folgt:

$$\begin{aligned} \sigma_m^+ \sigma_m^- &= C_m^\dagger C_m; \\ \left. \begin{aligned} \sigma_m^+ \sigma_{m+1}^+ &= C_m^\dagger C_{m+1}^\dagger, & \sigma_m^- \sigma_{m+1}^- &= -C_m C_{m+1}, \\ \sigma_m^+ \sigma_{m+1}^- &= C_m^\dagger C_{m+1}, & \sigma_m^- \sigma_{m+1}^+ &= -C_m C_{m+1}^\dagger, \end{aligned} \right\} \text{für } m < L; \\ \sigma_L^+ \sigma_1^+ &= -(-1)^N C_L^\dagger C_1^\dagger, & \sigma_L^- \sigma_1^- &= (-1)^N C_L C_1, \\ \sigma_L^+ \sigma_1^- &= -(-1)^N C_L^\dagger C_1, & \sigma_L^- \sigma_1^+ &= (-1)^N C_L C_1^\dagger. \end{aligned}$$

Hierbei ist

$$N = \sum_{m=1}^L \sigma_m^+ \sigma_m^- = \sum_{m=1}^L C_m^\dagger C_m \quad (4.30)$$

der Teilchenzahloperator, der die Anzahl vorhandener Fermionen auf einer Zeile angibt.

Bilinearformen der Operatoren σ_m^\pm auf denselben und benachbarten Gitterplätzen bleiben also bilinear in den Fermionoperatoren C_m , C_m^\dagger ; für die in (4.17) ausgeschriebenen Randterme, die durch die in x -Richtung periodischen Spinrandbedingungen hervorgerufen werden, findet man etwas kompliziertere Ausdrücke, die aber dennoch behandelt werden können.

Andere Kombinationen der Operatoren σ_m^\pm überstehen diese Transformation allerdings nicht bzw. in keiner weiter verwertbaren Gestalt. Dies beschränkt die analytische Lösung auf nächste-Nachbar-Wechselwirkungen in zwei Dimensionen sowie auf ein verschwindendes äußeres Magnetfeld, dessen Term aus diesem Grund hier auch nicht angegeben wurde. Hierdurch erklärt sich auch die Notwendigkeit der Ähnlichkeitstransformation (4.4).

Gemäß den gefundenen Transformationsregeln lauten somit V_1 und V_2 :

$$V_1 = \exp \left[-2\tilde{\beta} \sum_{m=1}^L \left(C_m^\dagger C_m - \frac{1}{2} \right) \right], \quad (4.31)$$

$$\begin{aligned} V_2 = \exp \left[\beta \left\{ \sum_{m=1}^{L-1} \left(C_m^\dagger - C_m \right) \left(C_{m+1}^\dagger + C_{m+1} \right) \right. \right. \\ \left. \left. - (-1)^N \left(C_L^\dagger - C_L \right) \left(C_1^\dagger + C_1 \right) \right\} \right]. \quad (4.32) \end{aligned}$$

Man beachte den Randterm in V_2 (4.32). Der nun folgende Abschnitt beschäftigt sich mit dessen Auswirkungen.

4.1.3 Aufteilung von V in V^+ und V^-

Der Randterm in V_2 (4.32) enthält den Ausdruck $(-1)^N$, wobei N der Fermionzähler (4.30) ist. Er soll näher untersucht werden.

Mit $N = \sum \sigma_m^+ \sigma_m^-$ (4.30) folgt

$$(-1)^N = \exp(i\pi N) = \prod_{m=1}^L \exp(i\pi \sigma_m^+ \sigma_m^-) \stackrel{(4.21)}{=} \prod_{m=1}^L (-\sigma_m^z) \stackrel{(4.26)}{=} U. \quad (4.33)$$

$(-1)^N$ stellt also den Spinumkehroperator U (nach einer Basistransformation) in der fermionischen Formulierung dar. Die Verwendung von $(-1)^N$ bietet allerdings im Folgenden neue Aspekte und hilft die aus Kapitel 2 bekannte Lösung besser nachzuvollziehen.

Während der Charakter als Symmetrie und Erhaltungsgröße über die Vertauschbarkeit mit V (respektive H) folgt, wird die Rolle als Paritätsoperator direkt an dessen Form ersichtlich: $(-1)^N$ kann offenbar nur die Werte $\alpha = +1$ und $\alpha = -1$ annehmen, wobei nach Zuständen mit gerader und ungerader Fermionzahl unterschieden wird:

$$\alpha = \begin{cases} +1 & \text{für gerade Fermionzahl,} \\ -1 & \text{für ungerade Fermionzahl.} \end{cases} \quad (4.34)$$

Aufgrund von $(-1)^N = U$ ist die Benennung mit α aus der früheren Definition (3.18) ($\alpha = +1$: gerade Anzahl an Minuszeichen in den Eigenwerten, $\alpha = -1$: ungerade Anzahl an Minuszeichen) bewußt gewählt; dieser Zusammenhang wird weiter unten explizit aufgedeckt.

Die Zustände mit gerader Fermionzahl $|\psi_g\rangle$, für die wegen

$$(-1)^N |\psi_g\rangle = + |\psi_g\rangle$$

$\alpha = +1$ gilt, sind demnach symmetrisch.

Zustände mit ungerader Fermionzahl $|\psi_u\rangle$, für die

$$(-1)^N |\psi_u\rangle = - |\psi_u\rangle$$

gilt, sind mit $\alpha = -1$ hingegen antisymmetrisch.

Es ist daher sinnvoll, den Raum \mathcal{H} der Eigenzustände in \mathcal{H}_+ und \mathcal{H}_- zu unterteilen (\mathcal{H}_α mit $\alpha = \pm 1$):

$$\begin{aligned} \mathcal{H}_+ : & \text{ Raum der symmetrischen Eigenzustände} \\ & \text{mit gerader Fermionzahl} \end{aligned} \quad (4.35)$$

$$\begin{aligned} \mathcal{H}_- : & \text{ Raum der antisymmetrischen Eigenzustände} \\ & \text{mit ungerader Fermionzahl} \end{aligned} \quad (4.36)$$

Über eben diese Aufteilung der Räume gelingt es, den Randterm in V_2 weiter auszuwerten. Hierzu wird V_2 folgendermaßen in V_2^+ und V_2^- aufgespalten:

$$V_2^+ = \exp \left[\beta \left\{ \sum_{m=1}^{L-1} (C_m^\dagger - C_m) (C_{m+1}^\dagger + C_{m+1}) - (C_L^\dagger - C_L) (C_1^\dagger + C_1) \right\} \right]; \quad (4.37)$$

$$V_2^- = \exp \left[\beta \left\{ \sum_{m=1}^{L-1} (C_m^\dagger - C_m) (C_{m+1}^\dagger + C_{m+1}) + (C_L^\dagger - C_L) (C_1^\dagger + C_1) \right\} \right]. \quad (4.38)$$

Damit wird $V = V_2 V_1$ in V^+ und V^- geteilt.

Bei den hier behandelten periodischen Spin-Randbedingungen $\tau_x = +1$, $\tau_t = +1$ gilt offensichtlich

Eigenvektoren von V^+ sind aus \mathcal{H}_+ ,

Eigenvektoren von V^- sind aus \mathcal{H}_- ,

wie man durch Vergleich von (4.37) und (4.38) mit (4.32) sieht.

Für die Zustandssumme Z'_{++} (die ohne den Vorfaktor wie in (2.42) definiert wird) erhält man dementsprechend:

$$Z'_{++} = \text{Sp} [V^T] = \text{Sp}_{\mathcal{H}_+} [(V^+)^T] + \text{Sp}_{\mathcal{H}_-} [(V^-)^T]. \quad (4.39)$$

Diese getrennte Spurbildung über V^+ und V^- tritt ebenfalls auf in der Onsager-Kaufman-Lösung aufgrund eines anders gearteten Randterms, der ebenfalls den Symmetriegerator U enthält. Die Identifizierung von V^+ und V^- aus beiden Lösungen wird später in 4.1.5 anhand der Eigenwerte offensichtlich werden.

4.1.4 Randbedingungen für Fermionoperatoren

Eine große Veranschaulichung besteht in dem nun folgenden Schritt. Hierzu werden zunächst die in den Randtermen von V_2^+ (4.37) und V_2^- (4.38) übriggebliebenen Vorzeichen auf Randbedingungen für die Fermionoperatoren $\epsilon_x = \pm 1$ in der x -Richtung umgeschrieben:

$$V_2^+ = \exp \left[\beta \sum_{m=1}^L (C_m^\dagger - C_m) (C_{m+1}^\dagger + C_{m+1}) \right]$$

mit $C_{L+1} = -C_1$ und $C_{L+1}^\dagger = -C_1^\dagger$; (4.40)
antiperiodische RB $\epsilon_x = -1$

$$V_2^- = \exp \left[\beta \sum_{m=1}^L (C_m^\dagger - C_m) (C_{m+1}^\dagger + C_{m+1}) \right]$$

mit $C_{L+1} = +C_1$ und $C_{L+1}^\dagger = +C_1^\dagger$. (4.41)
periodische RB $\epsilon_x = +1$

Über eine diskrete Fouriertransformation

$$C_m = \frac{e^{-i\pi/4}}{\sqrt{L}} \sum_k \exp(i p_k m) \tilde{C}_k$$

werden nun (Fermion-) Impulse p_k eingeführt und die vorhandenen Größen in deren Abhängigkeit formuliert. Nun ist aber bereits aus der elementaren Statistik [45] bekannt, daß periodische bzw. antiperiodische Randbedingungen zu einer Diskretisierung der Impulse in der folgenden Form führen:

$$V^+ : \quad \text{antiperiodische RB für Fermionen} \quad \epsilon_x = -1$$

$$\implies p_k = \frac{\pi}{L}, \frac{3\pi}{L}, \frac{5\pi}{L}, \dots, \frac{(2L-1)\pi}{L}; \quad (4.42)$$

$$p_k = \frac{\pi k}{L} \quad \text{mit } k \text{ ungerade, } \quad k = 1, 3, 5, \dots, 2L-1; \quad (4.43)$$

$$V^- : \quad \text{periodische RB für Fermionen} \quad \epsilon_x = +1$$

$$\implies p_k = 0, \frac{2\pi}{L}, \frac{4\pi}{L}, \dots, \frac{(2L-2)\pi}{L}; \quad (4.44)$$

$$p_k = \frac{\pi k}{L} \quad \text{mit } k \text{ gerade, } \quad k = 0, 2, 4, \dots, 2L-2. \quad (4.45)$$

Da sich die bisherige Indizierung der Operatoren auf die lokalisierten Gitterpunkte in einem Gitter endlicher Größe bzw. in einer Gitterzeile der Länge L

bezog, ist die Fouriertransformation von diskreter Art (endlicher Wertesatz); dementsprechend erhält man in (4.42)-(4.45) auch nur endlich viele, nämlich jeweils L Impulsverwerte. Im Limes $L \rightarrow \infty$ hingegen liegt ein Gitter unendlicher Größe vor, und wie an (4.42)-(4.45) abzulesen ist, erhält man dann unendlich viele sowie kontinuierliche Impulsverwerte.

Dieses Ergebnis erhalten ebenfalls Onsager und Kaufman, allerdings als rein algebraische Bedingung während der Diagonalisierungsprozedur.

4.1.5 Ergebnis nach Diagonalisierung

Es verbleibt noch die eigentliche Diagonalisierung von V^+ und V^- . Die Prozedur selber ist komplizierterer und längerer Art [17] und wird hier deshalb nicht vorgeführt. Es sei nur kurz vermerkt, daß sich Ähnlichkeiten zur BCS-Theorie der Supraleitung [51, 52] abzeichnen; wie in dieser hilft auch hier die Transformation nach Bogoliubov [53] und Valatin [54], die die fouriertransformierten Erzeuger \tilde{C}_k^\dagger und Vernichter \tilde{C}_k auf geschickte Weise zu neuen Erzeugern ξ_k^\dagger und Vernichtern ξ_k linearkombiniert. Das Resultat nach erfolgter Diagonalisierung ist schließlich von bestechend einfacher Form:

$$V = \exp \left[- \sum_k \varepsilon_k \left(\xi_k^\dagger \xi_k - \frac{1}{2} \right) \right]. \quad (4.46)$$

Durch die Fouriertransformation des vorigen Abschnitts tritt nun k aus den Impulsverwerten als Index auf. Über die Auswahl ungerader k (4.43) bzw. gerader k (4.45) erhält man aus (4.46) V^+ bzw. V^- :

$$\epsilon_x = +1 \quad \longrightarrow \quad V^-; \quad k \text{ gerade}, \quad k = 0, 2, 4, \dots, 2L-2; \quad (4.47)$$

$$\epsilon_x = -1 \quad \longrightarrow \quad V^+; \quad k \text{ ungerade}, \quad k = 1, 3, 5, \dots, 2L-1. \quad (4.48)$$

Der Fermionzahloperator in den neuen Fermionoperatoren ξ_k^\dagger und ξ_k lautet nun

$$N = \sum_k \xi_k^\dagger \xi_k = \sum_k n_k, \quad (4.49)$$

wobei n_k (bei Anwendung auf Eigenzustände) aufgrund der Fermi-Statistik nur die Werte 0 und 1 annehmen kann:

$$n_k \in \{0, 1\} \quad (4.50)$$

Hierzu sei angemerkt, daß sich die Anzahl vorhandener Fermionen bei den vorgenommenen Transformationen nicht geändert hat [17].

Die „Fermion-Energien“ ε_k ergeben sich identisch zu (2.52), (2.53) aus folgender Beziehung:

$$\cosh(\varepsilon_k) = \cosh(m_0) + 1 - \cos\left(\frac{\pi k}{L}\right). \quad (4.51)$$

Die Vorzeichenwahl ist dieselbe wie in (2.54), (2.55). (Die dortige Vorzeichenwahl ist gerade dem Artikel von Schultz, Mattis und Lieb [17] entnommen.)

4.1. Die Lösung des zweidimensionalen Ising-Modells mittels fermionischer Operatoren

Die Eigenwerte von V^+ und V^- lassen sich nun direkt an (4.46) ablesen. Bezeichnet man die Eigenwerte von V^+ wie bisher mit λ_i^+ , so erhält man gemäß (4.49) mit $n_k \in \{0, 1\}$:

$$\text{EW zu } V^+ : \quad \lambda_i^+ = \exp \left[- \sum_{\substack{k \\ \text{ungerade}}} \varepsilon_k \left(n_k - \frac{1}{2} \right) \right]. \quad (4.52)$$

Ist kein Fermion mit Impuls k vorhanden, d.h. $n_k = 0$, so tritt in dem Summanden $+\frac{1}{2}\varepsilon_k$ insgesamt ein Pluszeichen auf (unter Berücksichtigung aller Vorzeichen im Exponenten). Bei einem vorhandenen Fermion hingegen, d.h. $n_k = 1$, erhält der jeweilige Summand $-\frac{1}{2}\varepsilon_k$ insgesamt ein Minuszeichen.

$$\begin{aligned} n_k = 0 &: \text{kein Fermion} \Rightarrow \text{Pluszeichen} \\ n_k = 1 &: \text{Fermion} \Rightarrow \text{Minuszeichen} \end{aligned}$$

Damit ergeben sich aus (4.52) die Eigenwerte

$$\lambda_i^+ = \exp \left[\frac{1}{2} (\pm \varepsilon_1 \pm \varepsilon_3 \pm \varepsilon_5 \pm \dots \pm \varepsilon_{2L-1}) \right], \quad (4.53)$$

wobei die Vorzeichen jeweils unabhängig zu wählen sind, da die n_k sämtlich unabhängig voneinander sind.

Für die Eigenwerte λ_i^- von V^- ergibt sich analog:

$$\text{EW zu } V^- : \quad \lambda_i^- = \exp \left[- \sum_{\substack{k \\ \text{gerade}}} \varepsilon_k \left(n_k - \frac{1}{2} \right) \right] \quad (4.54)$$

$$= \exp \left[\frac{1}{2} (\pm \varepsilon_0 \pm \varepsilon_2 \pm \varepsilon_4 \pm \dots \pm \varepsilon_{2L-2}) \right]. \quad (4.55)$$

Die so erhaltenen Eigenwerte (4.53), (4.55) von V^+ und V^- sind in Übereinstimmung mit denen (2.47), (2.48) aus der Onsager-Kaufman-Lösung. Das Zustandekommen der Vorzeichen im Exponenten lässt sich hier allerdings anhand der Besetzungszahldarstellung für Fermionen besser veranschaulichen.

Mit den nun bekannten Eigenwerten kann die Zustandssumme (4.39) bei periodischen Spin-Randbedingungen

$$Z'_{++} = \text{Sp}_{\mathcal{H}_+} \left[(V^+)^T \right] + \text{Sp}_{\mathcal{H}_-} \left[(V^-)^T \right]$$

explizit aufgestellt werden; hierbei müssen allerdings die Restriktionen bezüglich \mathcal{H}_+ und \mathcal{H}_- berücksichtigt werden. \mathcal{H}_+ (4.35) verlangt die Beschränkung auf die symmetrischen Eigenzustände mit einer geraden Fermionanzahl; für die Eigenwerte bedeutet dies nach obigen Überlegungen, daß von allen möglichen Vorzeichenkombinationen nur diejenigen erlaubt sind, die eine gerade Anzahl an Minuszeichen aufweisen. Bei \mathcal{H}_- (4.36) hingegen sind nur antisymmetrische

Zustände mit einer ungeraden Fermionzahl erlaubt, und dementsprechend dürfen die Eigenwerte nur eine ungerade Anzahl an Minuszeichen vorweisen.

Die Restriktion \mathcal{H}_α mit $\alpha = \pm 1$ (4.34) sortiert damit jeweils die Hälfte der Eigenwerte von V^+ und V^- aus.

$\alpha = +1$: gerade Fermionzahl, $\mathcal{H}_+ \Rightarrow$ gerade Anzahl an Minuszeichen

$\alpha = -1$: ungerade Fermionzahl, $\mathcal{H}_- \Rightarrow$ ungerade Anzahl an Minuszeichen

Die bereits früher angedeutete Konsistenz mit der bisherigen Definition von α (3.18) wird hier also offenkundig und rechtfertigt die Benennung mit α in (4.34).

Die dadurch implizierte direkte Analogie zu Onsager und Kaufman lässt sich mittels der Projektoren $\frac{1}{2}(1 \pm (-1)^N) = \frac{1}{2}(1 \pm U)$ herausstellen, die (4.39) in die Form (2.44) bringen:

$$Z'_{++} = \text{Sp} \left[\frac{1}{2} (1 + (-1)^N) (V^+)^T \right] + \text{Sp} \left[\frac{1}{2} (1 - (-1)^N) (V^-)^T \right]. \quad (4.56)$$

An (4.56) wird offensichtlich, wie sehr sich die hier diskutierten Lösungswege im Ergebnis gleichen bei unterschiedlicher algebraischer Herangehensweise.

Insgesamt erhält man also in Übereinstimmung mit dem früheren Ergebnis (2.79):

$$\begin{aligned} Z'_{++} = & \sum_{\{\text{gerade } MZ\}} \exp \left[\frac{T}{2} (\pm \varepsilon_1 \pm \varepsilon_3 \pm \varepsilon_5 \pm \dots \pm \varepsilon_{2L-1}) \right] \\ & + \sum_{\{\text{ungerade } MZ\}} \exp \left[\frac{T}{2} (\pm \varepsilon_0 \pm \varepsilon_2 \pm \varepsilon_4 \pm \dots \pm \varepsilon_{2L-2}) \right]. \end{aligned} \quad (4.57)$$

Um zur Kurzschreibweise mit den Größen Y_α^δ (siehe Gln. (3.17)-(3.20)) überzugehen, beobachte man, daß die Größe $\delta = \pm 1$ (3.19) zur Unterscheidung zwischen geraden und ungeraden k -Werten offensichtlich mit der Fermion-RB ϵ_x (4.47), (4.48) identisch ist:

$$\epsilon_x = \delta.$$

Unter Verwendung der Definitionen (3.17)-(3.20) erhält man somit:

$$Y_\alpha^\delta = Y_\alpha^{\epsilon_x} = \text{Sp}_{\mathcal{H}_\alpha} \left[(V^{-\epsilon_x})^T \right], \quad (4.58)$$

wobei $V^{-\epsilon_x}$ so zu verstehen ist, daß sich für $\epsilon_x = +1$ V^- und für $\epsilon_x = -1$ V^+ ergibt, wie an (4.47) und (4.48) abzulesen ist.

Damit schreibt sich die Zustandssumme (4.39)

$$Z'_{++} = Y_+^- + Y_-^+ \quad (4.59)$$

in Übereinstimmung mit (3.21).

4.1.6 Erklärung des Energiespektrums

Für den Hamilton-Operator H erhält man gemäß (siehe (2.67))

$$V = \exp[-H]$$

aus (4.46) folgende einfache Form:

$$H = \sum_k \varepsilon_k \left(\xi_k^\dagger \xi_k - \frac{1}{2} \right). \quad (4.60)$$

Gemäß der Aufspaltung von V in V^- und V^+ wird auch H in H^- und H^+ unterteilt:

$$\epsilon_x = +1 \quad \longrightarrow \quad V^- = \exp[-H^-], \quad H^- = \sum_{\substack{k \\ \text{gerade}}} \varepsilon_k \left(\xi_k^\dagger \xi_k - \frac{1}{2} \right); \quad (4.61)$$

$$\epsilon_x = -1 \quad \longrightarrow \quad V^+ = \exp[-H^+], \quad H^+ = \sum_{\substack{k \\ \text{ungerade}}} \varepsilon_k \left(\xi_k^\dagger \xi_k - \frac{1}{2} \right). \quad (4.62)$$

Mit (4.49) und (4.50) lauten die zugehörigen Energie-Eigenwerte E_- und E_+ :

$$\text{Eigenwerte zu } H^- : \quad E_- = \sum_{\substack{k \\ \text{gerade}}} \varepsilon_k \left(n_k - \frac{1}{2} \right) \quad (4.63)$$

$$= -\frac{1}{2} (\pm \varepsilon_0 \pm \varepsilon_2 \pm \varepsilon_4 \pm \dots \pm \varepsilon_{2L-2}); \quad (4.64)$$

$$\text{Eigenwerte zu } H^+ : \quad E_+ = \sum_{\substack{k \\ \text{ungerade}}} \varepsilon_k \left(n_k - \frac{1}{2} \right) \quad (4.65)$$

$$= -\frac{1}{2} (\pm \varepsilon_1 \pm \varepsilon_3 \pm \varepsilon_5 \pm \dots \pm \varepsilon_{2L-1}). \quad (4.66)$$

Die Diskussion erfolgt zunächst für die allgemeinen Ausdrücke; die Projektion auf die Unterräume \mathcal{H}_+ und \mathcal{H}_- wird weiter unten erörtert.

Anhand von (4.61) und (4.62) bzw. (4.63) und (4.65) lässt sich der Aufbau des Energiespektrums nun folgendermaßen erklären:

Ausgangspunkt sind die Grundzustands-Energien von H_+ und H_- , die wie in Kapitel 2 mit E_{0+} und E_{0-} bezeichnet werden. Diese sind durch die kleinsten Energien von E_+ und E_- gegeben (es sei $\beta > \beta_C$ und somit $\varepsilon_0 < 0$, vgl. mit (2.71) und (2.72)):

$$E_{0+} = -\frac{1}{2} (+\varepsilon_1 + \varepsilon_3 + \varepsilon_5 + \dots + \varepsilon_{2L-1});$$

$$E_{0-} = -\frac{1}{2} (-\varepsilon_0 + \varepsilon_2 + \varepsilon_4 + \dots + \varepsilon_{2L-2})$$

$$= -\frac{1}{2} (+|\varepsilon_0| + \varepsilon_2 + \varepsilon_4 + \dots + \varepsilon_{2L-2}).$$

Hierzu noch einige Worte: Entsprechend der oben vorgenommenen Aufteilung sind H_+ und H_- getrennt zu betrachten, da keine Übergänge zwischen geraden und ungeraden k -Werten möglich sind. Daher wird E_{0+} im Folgenden als Grundzustandsenergie bezüglich H_+ bezeichnet und E_{0-} entsprechend als Grundzustandsenergie von H_- . Man denke sich hierzu eine entsprechende Unterteilung der Eigenzustände. (Diese Sprachweise vermeidet Mißverständnisse; schließlich ist aus 2.2.10 bekannt, daß E_{0+} bei endlichem L der niedrigste aller Energieeigenwerte ist und somit die Grundzustandsenergie des Gesamtsystems stellt.)

Des Weiteren fällt auf, daß E_{0+} (den 0 Minuszeichen entsprechend, s.o.) zu einem Zustand mit 0 Fermionen gehört. Der entsprechende Grundzustand $|0+\rangle$ kann daher als Vakuum interpretiert werden, in dem kein Fermion anwesend ist.

Bei E_{0-} gestaltet sich dies etwas komplizierter: Offensichtlich gehört E_{0-} zu einem Zustand $|0-\rangle$, in dem das ε_0 -Fermion anwesend ist. Es handelt sich gerade um den Grundzustand, da $\varepsilon_0 < 0$ ist, und $|0-\rangle$ somit die niedrigste Energie-Konfiguration aufweist (alle anderen ε_k sind positiv). In diesem Sinne läßt sich ε_0 als negative Fermion-Energie auffassen. Der Zustand $|0-\rangle$ kann daher in Anlehnung zur Dirac-Theorie folgendermaßen als Vakuumzustand interpretiert werden: Der „Dirac-See“ besteht aus nur einem einzigen negativen Energiezustand, nämlich ε_0 . Der Vakuum- bzw. Grund-Zustand ist dann durch die Besetzung des Dirac-Sees gegeben, d.h. durch die Anwesenheit des ε_0 -Teilchens. Dessen Fehlen hingegen entspricht einem Loch und damit einer Anregung.

Oberhalb der kritischen Temperatur $\beta < \beta_C$ ist diese Diskussion übrigens nicht nötig, da dann $\varepsilon_0 > 0$ ist und somit alle ε_k positiv sind; für die vorliegende Arbeit interessiert aber der Tieftemperaturbereich. Man vergleiche hierzu die Diskussion in [17].

Ausgehend von den Grundzuständen E_{0+} und E_{0-} lassen sich nun nach (4.63) und (4.65) höhere Energiezustände als n -Fermion-Anregungs-Zustände interpretieren, die durch die Erzeugung von n Fermionen mit verschiedenen Energien ε_k aus diesen Grundzuständen hervorgehen. Dies rechtfertigt auch die Bezeichnung der ε_k als Fermion-Energien in (4.51). Im Folgenden wird, um Mißverständnisse zu vermeiden, von n -Fermion-Anregungs-Zuständen gesprochen, die sich auf die jeweiligen Grundzustände beziehen. Diese Sprachweise ist eindeutiger als der Begriff n -Fermion-Zustand und zudem besser an die noch folgende Thematik angepaßt. Das nachfolgende Beispiel macht den Unterschied deutlich.

Nun läßt sich nämlich auch das in Abb. 2.15-2.18 dargestellte Energiespektrum erklären, dessen Gestalt bereits die Idee zu einer Teilcheninterpretation lieferte. Entsprechend den dort erlaubten Vorzeichenkombinationen (2.69), (2.70), die in der fermionischen Darstellung durch die Restriktion auf \mathcal{H}_+ und \mathcal{H}_- beschrieben werden, treten in diesem (für $\beta > \beta_C$) offensichtlich nur geradzahlige Fermion-Anregungen auf: An

$$E_+ = -\frac{1}{2} (\pm \varepsilon_1 \pm \varepsilon_3 \pm \varepsilon_5 \pm \dots \pm \varepsilon_{2L-1}) \quad (4.67)$$

mit gerader Anzahl an Minuszeichen

wird dies nach obigen Überlegungen schnell einsichtig: Der geraden Anzahl an Minuszeichen entspricht eine gerade Anzahl an Fermionen; im Grundzustand $|0+\rangle$ mit E_{0+} (0 Minuszeichen) ist kein Fermion vorhanden, so daß bezüglich E_{0+} nur geradzahlige Fermion-Anregungen auftreten.

Um dies bei

$$E_- = -\frac{1}{2} (\pm \varepsilon_0 \pm \varepsilon_2 \pm \varepsilon_4 \pm \dots \pm \varepsilon_{2L-2}) \quad (4.68)$$

mit ungerader Anzahl an Minuszeichen

und einer zunächst ungeraden Fermionanzahl nachzuvollziehen, beachte man das Vorhandensein eines Fermions (1 Minuszeichen in E_{0-}) im Grundzustand $|0-\rangle$. Auf diesen bezogen verbleiben demnach geradzahlige Fermion-Anregungen. Dies läßt sich verdeutlichen mithilfe der negativen Energie $\varepsilon_0 = -|\varepsilon_0|$ des im Grundzustand befindlichen Fermions, mit der E_- umgeschrieben werden kann zu

$$E_- = -\frac{1}{2} (\pm |\varepsilon_0| \pm \varepsilon_2 \pm \varepsilon_4 \pm \dots \pm \varepsilon_{2L-2}) . \quad (4.69)$$

mit gerader Anzahl an Minuszeichen

Bezüglich der Grundzustandsenergie $E_{0-} = -\frac{1}{2} (+|\varepsilon_0| + \varepsilon_2 + \dots + \varepsilon_{2L-2})$ treten somit lediglich geradzahlige Fermionanregungen auf, da der Übergang zu einem Minuszeichen in einem der Summanden einem aus E_{0-} angeregten Fermion entspricht.

Insgesamt sind somit in Z_{++} für $\beta > \beta_C$ lediglich n -Fermion-Anregungen mit geradem n erlaubt.

Es sei also noch einmal in aller Ausdrücklichkeit betont, daß sich die Restriktion \mathcal{H}_\pm auf eine gerade/ungerade Fermionanzahl stets auf die insgesamt vorhandenen Fermionen bezieht, während der Begriff der n -Fermion-Anregung stets auf die Grundzustände von H^+ und H^- bezogen ist. Der Zusammenhang zwischen diesen Begriffen hängt von der Art des Grundzustands ab; für $\beta > \beta_C$ gilt:

H^+, E_+ :

$$\left\{ \begin{array}{l} \text{gerade} \\ \text{ungerade} \end{array} \right\} \text{Fermionanzahl} \iff \left\{ \begin{array}{l} \text{gerade} \\ \text{ungerade} \end{array} \right\} \text{Fermion-Anregungen} \quad (4.70)$$

$E_{0+}, |0+\rangle$: kein Fermion

H^-, E_- :

$$\left\{ \begin{array}{l} \text{gerade} \\ \text{ungerade} \end{array} \right\} \text{Fermionanzahl} \iff \left\{ \begin{array}{l} \text{ungerade} \\ \text{gerade} \end{array} \right\} \text{Fermion-Anregungen} \quad (4.71)$$

$E_{0-}, |0-\rangle$: energetisch negatives ε_0 -Fermion

Es stellt sich die Frage, ob sich dieser Zusammenhang für H^- , E_- nicht wie bei H^+ , E_+ vereinfachen ließe, indem man zu einer anderen Vorzeichenkonvention für ε_0 wie z.B. der von Kaufman (2.61) überginge.

Dies wäre in der Tat auf den ersten Blick möglich. Dafür bezahlte man allerdings den Preis, daß obiger Wechsel gerade \leftrightarrow ungerade tief im Diagonalisierungsverfahren steckte; man vergleiche hierzu die an (2.61) anschließenden Bemerkungen: Dies geschähe nämlich über Änderungen in den Restriktionen \mathcal{H}_\pm . Die Lösung verlöre dadurch viel an Übersicht und Anschaulichkeit, während obige Diskussion auch stets auf veranschaulichendem Niveau geführt werden kann (zudem trüte dieselbe Problematik dann im Hochtemperaturbereich auf). Aus diesem Grund wurde für diese Arbeit die Vorzeichenkonvention aus [17] verwendet.

Um die Zusammenhänge (4.70) und (4.71) noch prägnant in eine Formel zu gießen, sei mit N die Gesamt-Fermionzahl und mit n (wie schon getan) die Anzahl der Fermion-Anregungen bezeichnet. Zwischen diesen gilt nun für $\delta = \pm 1$ in $H^{-\delta}$ und $E_{-\delta}$:

$$(-1)^N = (-\delta) (-1)^n. \quad (4.72)$$

Für $\delta = -1$ ist somit der Fall (4.70), für $\delta = +1$ der Fall (4.71) enthalten. In (4.67) sind also sowohl N als auch n gerade, während in (4.68) aus einem ungeraden N ein gerades n folgt, wie an (4.69) gezeigt.

Bei endlichem L ist das Spektrum auf 2^L Eigenwerte beschränkt (siehe hierzu die Abzählungen in Kapitel 2; in den Abbildungen zählt man aufgrund von Entartungen weniger).

Durch Abzählen kann man sich davon überzeugen, daß von den in Abb. 2.15–2.18 sichtbaren Bänderstrukturen im Bereich $\beta > \beta_C$ ein einzelnes Band zu einer n -Fermion-Anregung mit festem n gehört. Das Band entsteht aufgrund der unterschiedlichen, aber nahe beieinander liegenden Fermionenergien ε_k mit variablem Impuls p_k ; die Beiträge zu einem Band stammen dabei sowohl von H_+ als auch von H_- .

Beim Übergang zum Hochtemperaturbereich $\beta < \beta_C$ macht sich der Vorzeichenwechsel von ε_0 bemerkbar. Man erkennt diesen am Abknicken der Kurven, wovon die zu H^- gehörigen Eigenwerte betroffen sind. In diesem Temperaturbereich entspricht die Gesamtfermionzahl auch für H^- der Anzahl angeregter Fermionen, da alle ε_k positiv sind, und der Grundzustand dann kein Teilchen enthält ((4.71) und (4.72) gelten dann nicht mehr). Man könnte E_{0-} dementsprechend auch als Tieftemperaturgrundzustand von H^- bezeichnen, falls man nicht auf den Dirac-See zurückgreifen möchte. Da somit für $\beta < \beta_C$ geradzahlige Anregungen von H^+ und ungeradzahlige von H^- auftreten, ist dort aufgrund deren Überlagerung keine gestaffelte Bandstruktur mehr erkennbar.

Auf das Konzept der Fermion-Anregungen wird später in Kapitel 6 noch zurückgegriffen.

4.2 Zusammenfassung: Vergleich der fermionischen Darstellung mit der Onsager-Kaufman-Lösung

Im Verlauf des letzten Abschnitts hat sich herausgestellt, daß algebraische Ausdrücke in der Zustandssumme der Onsager-Kaufman-Lösung zusätzliche physikalische Bedeutung bzw. Veranschaulichung erlangen, wenn man zur fermionischen Darstellung von Schultz, Mattis und Lieb übergeht.

Diese Korrespondenz wird in der folgenden Tabelle zusammengefaßt, die sich an den Eigenschaften der auftretenden Eigenwerte geeignet festmachen läßt.

Eigenschaft der Eigenwerte $\mathcal{E}_\alpha^\delta$	Beschreibung in Onsager-Lösung	Beschreibung in fermionischer Darstellung
gerade Anzahl an Minuszeichen	$\alpha = +1$ symmetrische Zustände $U \psi_S\rangle = + \psi_S\rangle$ Projektor $\frac{1}{2}(1+U)$ in Spur	$\alpha = +1$ symmetrische Zustände $(-1)^N \psi_g\rangle = + \psi_g\rangle$ gerade Fermionzahl, \mathcal{H}_+
ungerade Anzahl an Minuszeichen	$\alpha = -1$ antisymm. Zustände $U \psi_A\rangle = - \psi_A\rangle$ Projektor $\frac{1}{2}(1-U)$ in Spur	$\alpha = -1$ antisymm. Zustände $(-1)^N \psi_u\rangle = - \psi_u\rangle$ ungerade Fermionzahl, \mathcal{H}_-
k gerade $k = 0, 2, 4, \dots, 2L-2$	$\delta = +1 \rightarrow V^-, H^-$ Diagonalisierung	$\epsilon_x = \delta = +1 \rightarrow V^-, H^-$ period. RB für Fermionen
k ungerade $k = 1, 3, 5, \dots, 2L-1$	$\delta = -1 \rightarrow V^+, H^+$ Diagonalisierung	$\epsilon_x = \delta = -1 \rightarrow V^+, H^+$ antiperiod. RB für Fermionen
Paritätsoperator	U Spinumkehroperator	$(-1)^N = U$ N : Fermionzahloperator

Tabelle 4.1: Vergleich der Lösungsmethoden

Zudem sei noch an die Veranschaulichung der ε_k (2.52) als Fermionenergien und der $p_k = \frac{\pi k}{L}$ (2.53) als Fermionimpulse erinnert, mit denen sich das Energiespektrum als Anregungsspektrum verstehen läßt.

Die Angaben in Tab. 4.1 sind für Darstellung I gegeben unter den im Text genannten Konventionen. Um zur Darstellung II überzugehen, sind die auftretenden Größen durch die mit einem Hut (^) versehenen sowie $k = 0, 1, 2, \dots, 2L-1$ durch $l = 0, 1, 2, \dots, 2T-1$ und ϵ_x durch ϵ_t zu ersetzen, da sich die Propagationsrichtung der Transfermatrix ändert (siehe (3.29)).

4.3 Aufstellung der Sektor-Zustandssummen $Z_{\tau_x \tau_t}$

Der Fall periodischer RB für die Spins

$$\tau_x = +1, \quad \tau_t = +1$$

ist bereits ausführlich in Abschnitt 4.1 behandelt worden.

Insbesondere fanden sich die Restriktionen:

Eigenvektoren von V^+ sind aus \mathcal{H}_+ ;

Eigenvektoren von V^- sind aus \mathcal{H}_- .

Die Spinzustandssumme Z'_{++} ergab sich nach (4.39) durch unabhängige Spurbildung über V^+ und V^- unter diesen Bedingungen; unter Beachtung von (4.58) erhielt man:

$$\begin{aligned} Z'_{++} &= \text{Sp}_{\mathcal{H}_+} \left[(V^+)^T \right] + \text{Sp}_{\mathcal{H}_-} \left[(V^-)^T \right] \\ &= Y_+^- + Y_-^+. \end{aligned}$$

Die weiteren Sektor-Zustandssummen aus Tabelle 3.1 erhält man durch den Einbau antiperiodischer Randbedingungen für die (wohlgemerkt!) Spins.

Bei antiperiodischen RB senkrecht zur Richtung der Transfermatrix

$$\tau_x = -1, \quad \tau_t = +1$$

folgt anstatt (4.17):

$$\begin{aligned} V_2^{ap} &= \exp \left[\beta \left\{ \sum_{m=1}^{L-1} (\sigma_m^+ + \sigma_m^-) (\sigma_{m+1}^+ + \sigma_{m+1}^-) \right. \right. \\ &\quad \left. \left. - (\sigma_L^+ + \sigma_L^-) (\sigma_1^+ + \sigma_1^-) \right\} \right]. \end{aligned} \quad (4.73)$$

Die aus der Transformation (4.18), (4.19) folgenden Regeln führen anstatt (4.32) auf

$$\begin{aligned} V_2^{ap} &= \exp \left[\beta \left\{ \sum_{m=1}^{L-1} (C_m^\dagger - C_m) (C_{m+1}^\dagger + C_{m+1}) \right. \right. \\ &\quad \left. \left. + (-1)^N (C_L^\dagger - C_L) (C_1^\dagger + C_1) \right\} \right]. \end{aligned} \quad (4.74)$$

Der Randterm unterscheidet sich im Vorzeichen von (4.32).

Behält man die Definition von V_2^+ (4.37) und V_2^- (4.38) bei, so folgen aus dem veränderten Vorzeichen die Restriktionen

Eigenvektoren von V^+ sind aus \mathcal{H}_- ;

Eigenvektoren von V^- sind aus \mathcal{H}_+ .

Damit erhält man für die Zustandssumme

$$\begin{aligned} Z'_{-+} &= \text{Sp}_{\mathcal{H}_-} [(V^+)^T] + \text{Sp}_{\mathcal{H}_+} [(V^-)^T] \\ &= Y_-^- + Y_+^+ \end{aligned} \quad (4.75)$$

in Übereinstimmung mit (3.25).

In Richtung der Transfermatrix lassen sich antiperiodische RB

$$\tau_x = +1, \quad \tau_t = -1$$

realisieren durch den Einbau des Paritätsoperators U in die Spur, der zwischen symmetrischen und antisymmetrischen Eigenzuständen unterscheidet (siehe Abschnitt 3.1.2). Wie bereits in Gl. (4.33) festgestellt wurde, lässt sich U als $(-1)^N$ darstellen, wobei N der Fermionzähler ist. Letztere Gestalt ist für die vorliegende Formulierung über Restriktionen bezüglich gerader und ungerader Fermionzahl geeigneter:

$$\begin{aligned} Z'_{+-} &= \text{Sp}_{\mathcal{H}_+} [(-1)^N (V^+)^T] + \text{Sp}_{\mathcal{H}_-} [(-1)^N (V^-)^T] \\ &= \text{Sp}_{\mathcal{H}_+} [(V^+)^T] - \text{Sp}_{\mathcal{H}_-} [(V^-)^T] \\ &= Y_+^- - Y_-^+. \end{aligned}$$

Dieses Ergebnis stimmt mit (3.23) überein.

Durch Kombination oben aufgeführter Modifikationen für

$$\tau_x = -1, \quad \tau_t = -1$$

ergibt sich

$$\begin{aligned} Z'_{--} &= \text{Sp}_{\mathcal{H}_-} [(-1)^N (V^+)^T] + \text{Sp}_{\mathcal{H}_+} [(-1)^N (V^-)^T] \\ &= -\text{Sp}_{\mathcal{H}_-} [(V^+)^T] + \text{Sp}_{\mathcal{H}_+} [(V^-)^T] \\ &= -Y_-^- + Y_+^+, \end{aligned}$$

was (3.27) entspricht.

Ebensogut kann man auch hier die Transfermatrix auf den Spalten definieren und in x -Richtung wandern lassen (siehe Abb. 3.2). Man erhält dann die Zustandssummen $\hat{Z}_{\tau_x \tau_t}$ (3.31)-(3.34) in Darstellung II.

4.4 Fermionische Zustandssummen und Sektoren

Neben den bereits aus Kapitel 2 und 3 bekannten Spin-Zustandssummen $Z_{\tau_x \tau_t}$ können in der fermionischen Darstellung Fermion-Zustandssummen $Z_{\epsilon_x \epsilon_t}^F$ aufgestellt werden. Diese ergeben sich unter Beachtung der Randbedingungen für Fermionen. Letztere sind gegeben durch $\epsilon_x = \pm 1$, $\epsilon_t = \pm 1$, so daß auch hier vier Sektoren auftreten werden.

ferm. Sektor	Z^F	ϵ_x	ϵ_t
++	Z_{++}^F	+1	+1
+-	Z_{+-}^F	+1	-1
-+	Z_{-+}^F	-1	+1
--	Z_{--}^F	-1	-1

Tabelle 4.2: Übersicht der fermionischen Sektoren

Die Bezeichnung ϵ_x/t soll Verwechslungen mit den Spin-RB τ_x/t vermeiden.

4.4.1 Fermionische Zustandssummen in Darstellung I

Zur Vorgehensweise sei an Abbildung 2.4 erinnert. In Abschnitt 4.1 wurde bereits gefunden:

$$\epsilon_x = \delta = \begin{cases} +1 & \rightarrow V^-, \quad k \text{ gerade}, \\ -1 & \rightarrow V^+, \quad k \text{ ungerade}; \end{cases}$$

$$\alpha = \begin{cases} +1 & \rightarrow \mathcal{H}_+, \quad \text{gerade Anzahl an Minuszeichen}, \\ -1 & \rightarrow \mathcal{H}_-, \quad \text{ungerade Anzahl an Minuszeichen}. \end{cases}$$

Mit den Definitionen (3.17)-(3.20) ergab sich der Zusammenhang (4.58)

$$Y_\alpha^\delta = Y_\alpha^{\epsilon_x} = \text{Sp}_{\mathcal{H}_\alpha} \left[(V^{-\epsilon_x})^T \right];$$

dabei ist $V^{-\epsilon_x}$ so zu verstehen, daß sich für $\epsilon_x = +1$ V^- und für $\epsilon_x = -1$ V^+ ergibt, wie an (4.61) und (4.62) abzulesen ist.

Die fermionische Zustandssumme erschließt sich nun aus der Spur über die Teilräume \mathcal{H}_+ und \mathcal{H}_- .

Zuvor müssen aber noch die vertikalen RB $\epsilon_t = \pm 1$ berücksichtigt werden. Aus der Betrachtung der Zustandssumme als grassmannwertiges Integral folgt in Richtung der Transfermatrix eine scheinbare Vertauschung periodischer und antiperiodischer RB gegenüber dem Spin-Fall: Bei $\epsilon_t = +1$ wird zusätzlich $(-1)^N$ in die Spur eingebaut, bei $\epsilon_t = -1$ hingegen nicht (siehe [21], S. 251). Dieser Zusammenhang als Folge der Grassmann-Algebra ist in der Literatur bekannt und braucht hier deshalb nicht aus ersten Prinzipien hergeleitet zu werden. Damit lauten die fermionischen Zustandssummen $Z_{\epsilon_x \epsilon_t}^F$:

$$\begin{aligned} Z_{\epsilon_x, -}^F &= \text{Sp} \left[(V^{-\epsilon_x})^T \right] = \text{Sp}_{\mathcal{H}_+} \left[(V^{-\epsilon_x})^T \right] + \text{Sp}_{\mathcal{H}_-} \left[(V^{-\epsilon_x})^T \right] \\ &= Y_+^{\epsilon_x} + Y_-^{\epsilon_x}, \end{aligned} \quad (4.76)$$

$$\begin{aligned} Z_{\epsilon_x, +}^F &= \text{Sp} \left[(V^{-\epsilon_x})^T (-1)^N \right] = \text{Sp}_{\mathcal{H}_+} \left[(V^{-\epsilon_x})^T \right] - \text{Sp}_{\mathcal{H}_-} \left[(V^{-\epsilon_x})^T \right] \\ &= Y_+^{\epsilon_x} - Y_-^{\epsilon_x}. \end{aligned} \quad (4.77)$$

Der Vorfaktor ist für das Folgende vorteilhaft gewählt worden.

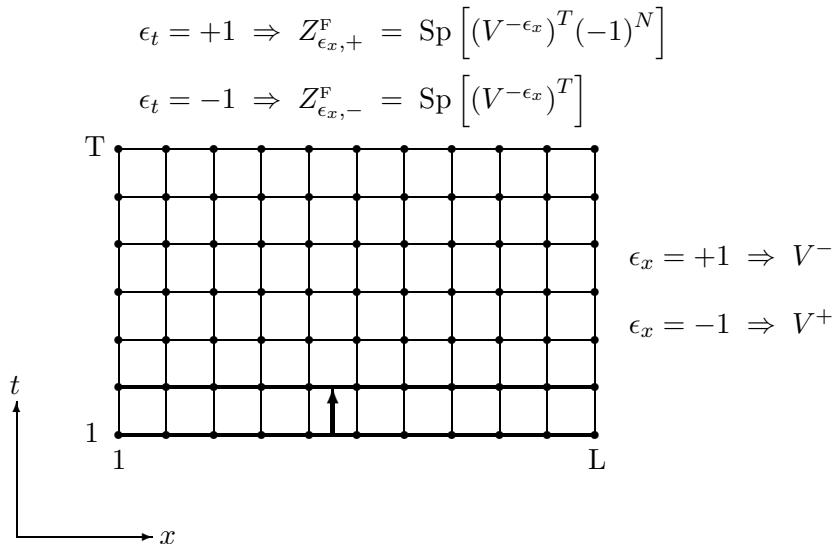


Abbildung 4.1: Fermionische RB in $Z_{\epsilon_x, \epsilon_t}^F$

Im Speziellen ergibt sich:

$$Z_{++}^F = Y_+^+ - Y_-^+ ; \quad (4.78)$$

$$Z_{+-}^F = Y_+^+ + Y_-^+ ; \quad (4.79)$$

$$Z_{-+}^F = Y_+^- - Y_-^- ; \quad (4.80)$$

$$Z_{--}^F = Y_+^- + Y_-^- . \quad (4.81)$$

Vergleicht man (4.78)-(4.81) mit (3.21), (3.23), (3.25) und (3.27), so erkennt man, daß sich die Spin-Zustandssumme eines jeden Sektors stets durch die vier fermionischen Sektor-Zustandssummen ausdrücken läßt [19, 20]:

$$Z'_{++} = \frac{1}{2} (-Z_{++}^F + Z_{+-}^F + Z_{-+}^F + Z_{--}^F) ; \quad (4.82)$$

$$Z'_{+-} = \frac{1}{2} (+Z_{++}^F - Z_{+-}^F + Z_{-+}^F + Z_{--}^F) ; \quad (4.83)$$

$$Z'_{-+} = \frac{1}{2} (+Z_{++}^F + Z_{+-}^F - Z_{-+}^F + Z_{--}^F) ; \quad (4.84)$$

$$Z'_{--} = \frac{1}{2} (+Z_{++}^F + Z_{+-}^F + Z_{-+}^F - Z_{--}^F) . \quad (4.85)$$

Man beachte, an welchen Stellen die Minuszeichen auftreten.

Darüber hinaus liefert eine nähere Betrachtung von (4.78)-(4.81) mit Identitäten wie in (2.80) und (2.81) eine Produktdarstellung der fermionischen Zustandssummen:

$$Z_{++}^F = \prod_{\substack{k \\ \text{gerade}}}^{2L-1} 2 \sinh \left(\frac{T}{2} \varepsilon_k \right) ; \quad (4.86)$$

$$Z_{+-}^F = \prod_{\substack{k \\ \text{gerade}}}^{2L-1} 2 \cosh \left(\frac{T}{2} \varepsilon_k \right) ; \quad (4.87)$$

$$Z_{-+}^F = \prod_{\substack{k \\ \text{ungerade}}}^{2L-1} 2 \sinh \left(\frac{T}{2} \varepsilon_k \right) ; \quad (4.88)$$

$$Z_{--}^F = \prod_{\substack{k \\ \text{ungerade}}}^{2L-1} 2 \cosh \left(\frac{T}{2} \varepsilon_k \right) . \quad (4.89)$$

Z_{++}^F enthält den Faktor $\sinh(\frac{T}{2} \varepsilon_0)$ und wird daher (als einzige) negativ für $\beta > \beta_C$.

Setzt man diese Produktdarstellungen (4.86)-(4.89) in (4.82)-(4.85) ein, so erhält man ein bekanntes Ergebnis, nämlich die kompakte Schreibweise der Spin-Zustandssummen (3.22), (3.24), (3.26) und (3.28) aus Abschnitt 3.1.3. Neu hinzugekommen ist allerdings das Wissen um den fermionischen Ursprung der dort auftretenden Summanden.

4.4.2 Fermionische Zustandssummen in Darstellung II

Es wird also der Fall einer in x -Richtung wandernden Transfermatrix betrachtet (Abb. 3.2). Die bisher auftretenden Größen werden daher (siehe Abschnitt 3.2, Gl. (3.29)) durch die entsprechenden mit $\hat{\cdot}$ ersetzt und die RB aus Tabelle 4.2 erfahren eine andere Behandlung als in Abb. 4.1.

Mit den Überlegungen aus den Abschnitten 3.2 und 4.4.1 findet sich:

Aufgrund der $x \leftrightarrow t$ -Vertauschung bewirkt nun die RB $\epsilon_t = \pm 1$ die Aufteilung von \hat{V} in \hat{V}^+ und \hat{V}^- und entspricht in dieser Darstellung daher δ (3.19):

$$\epsilon_t = \delta = \begin{cases} +1 & \longrightarrow \hat{V}^- , \quad l \quad \text{gerade}, \\ -1 & \longrightarrow \hat{V}^+ , \quad l \quad \text{ungerade}, \end{cases}$$

$$l = 0, 1, 2, \dots, 2T - 1 .$$

Die Größe \hat{Y}_α^δ (vgl. (4.58)) ergibt sich damit nach (3.29) zu

$$\hat{Y}_\alpha^\delta = \hat{Y}_\alpha^{\epsilon_t} = \text{Sp}_{\hat{\mathcal{H}}_\alpha} \left[\left(\hat{V}^{-\epsilon_t} \right)^L \right] .$$

Die RB $\epsilon_x = \pm 1$ in Richtung der Transfermatrix wird analog zu (4.76) und (4.77) durch $(-1)^{\hat{N}}$ berücksichtigt.

$$\begin{aligned} \hat{Z}_{-, \epsilon_t}^F &= \text{Sp} \left[\left(\hat{V}^{-\epsilon_t} \right)^L \right] = \text{Sp}_{\hat{\mathcal{H}}_+} \left[\left(\hat{V}^{-\epsilon_t} \right)^L \right] + \text{Sp}_{\hat{\mathcal{H}}_-} \left[\left(\hat{V}^{-\epsilon_t} \right)^L \right] \\ &= \hat{Y}_+^{\epsilon_t} + \hat{Y}_-^{\epsilon_t}, \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \hat{Z}_{+, \epsilon_t}^F &= \text{Sp} \left[\left(\hat{V}^{-\epsilon_t} \right)^L (-1)^{\hat{N}} \right] = \text{Sp}_{\hat{\mathcal{H}}_+} \left[\left(\hat{V}^{-\epsilon_t} \right)^L \right] - \text{Sp}_{\hat{\mathcal{H}}_-} \left[\left(\hat{V}^{-\epsilon_t} \right)^L \right] \\ &= \hat{Y}_+^{\epsilon_t} - \hat{Y}_-^{\epsilon_t}. \end{aligned}$$

Die fermionischen Zustandssummen in Darstellung II lauten damit

$$\hat{Z}_{++}^F = \hat{Y}_+^+ - \hat{Y}_-^+ ; \tag{4.90}$$

$$\hat{Z}_{+-}^F = \hat{Y}_+^- - \hat{Y}_-^- ; \tag{4.91}$$

$$\hat{Z}_{-+}^F = \hat{Y}_+^+ + \hat{Y}_-^+ ; \tag{4.92}$$

$$\hat{Z}_{--}^F = \hat{Y}_+^- + \hat{Y}_-^- . \tag{4.93}$$

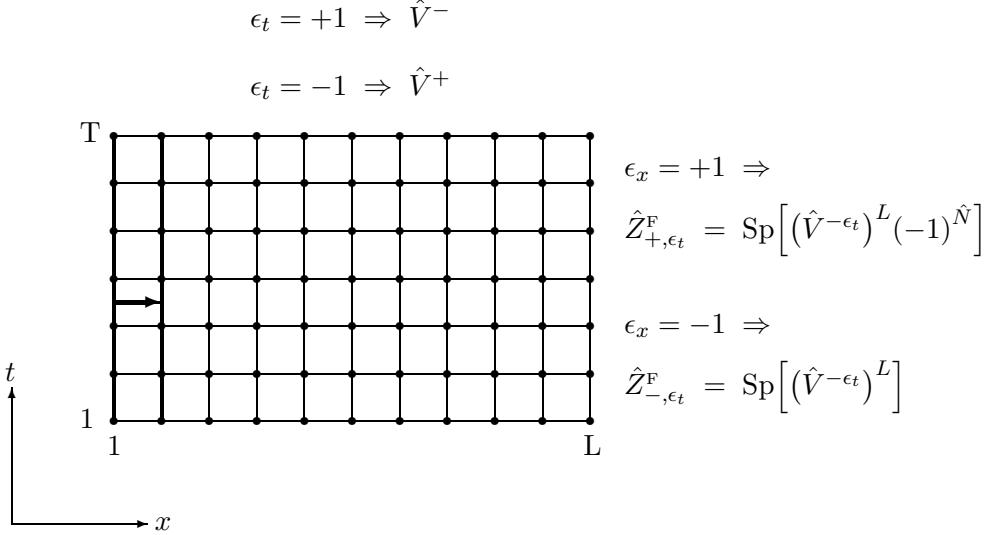


Abbildung 4.2: Fermionische RB in $\hat{Z}_{\epsilon_x, \epsilon_t}^F$

Analog zu (4.82)-(4.85) erhält man:

$$\hat{Z}'_{++} = \frac{1}{2} \left(-\hat{Z}_{++}^F + \hat{Z}_{+-}^F + \hat{Z}_{-+}^F + \hat{Z}_{--}^F \right); \quad (4.94)$$

$$\hat{Z}'_{+-} = \frac{1}{2} \left(+\hat{Z}_{++}^F - \hat{Z}_{+-}^F + \hat{Z}_{-+}^F + \hat{Z}_{--}^F \right); \quad (4.95)$$

$$\hat{Z}'_{-+} = \frac{1}{2} \left(+\hat{Z}_{++}^F + \hat{Z}_{+-}^F - \hat{Z}_{-+}^F + \hat{Z}_{--}^F \right); \quad (4.96)$$

$$\hat{Z}'_{--} = \frac{1}{2} \left(+\hat{Z}_{++}^F + \hat{Z}_{+-}^F + \hat{Z}_{-+}^F - \hat{Z}_{--}^F \right). \quad (4.97)$$

Man beachte die Position des Minuszeichens und vergleiche mit Darstellung I.

Als Produktdarstellungen ergeben sich hier:

$$\hat{Z}_{++}^F = \prod_{l \text{ gerade}}^{2T-1} 2 \sinh \left(\frac{L}{2} \hat{\varepsilon}_l \right); \quad (4.98)$$

$$\hat{Z}_{+-}^F = \prod_{l \text{ ungerade}}^{2T-1} 2 \sinh \left(\frac{L}{2} \hat{\varepsilon}_l \right); \quad (4.99)$$

$$\hat{Z}_{-+}^F = \prod_{l \text{ gerade}}^{2T-1} 2 \cosh \left(\frac{L}{2} \hat{\varepsilon}_l \right); \quad (4.100)$$

$$\hat{Z}_{--}^F = \prod_{l \text{ ungerade}}^{2T-1} 2 \cosh \left(\frac{L}{2} \hat{\varepsilon}_l \right). \quad (4.101)$$

\hat{Z}_{++}^F ist (als einzige) negativ für $\beta > \beta_C$.

Das Einsetzen von (4.98)-(4.101) in (4.94)-(4.97) liefert (analog zum vorigen

Abschnitt) eine kompakte Darstellung der Zustandssummen $\hat{Z}_{\tau_x \tau_t}$ aus Abschnitt 3.2 (man vergleiche unter Beachtung von (3.29) mit (3.22), (3.24), (3.26) und (3.28)).

4.5 Äquivalenzbeweis von Darstellung I und II

Die fermionischen Zustandssummen konnten in beiden Darstellungen (4.86)-(4.89), (4.98)-(4.101) als Produkte geschrieben werden. Mit Hilfe gewisser Identitäten können diese in Doppelprodukte umgewandelt werden, die die L - T -Symmetrie besser aufzeigen. Insbesondere wird sich herausstellen, daß die fermionischen Zustandssummen $Z_{\epsilon_x \epsilon_t}^F$ und $\hat{Z}_{\epsilon_x \epsilon_t}^F$ aus Darstellung I und II identisch sind, was zu derselben Schlussfolgerung für die Spin-Zustandssummen $Z_{\tau_x \tau_t}$, $\hat{Z}_{\tau_x \tau_t}$ führt.

4.5.1 Doppelproduktdarstellung der $Z_{\epsilon_x \epsilon_t}^F$ (Darstellung I)

Im Anhang B.3 werden folgende Identitäten bewiesen [50]:

$$\prod_{\substack{l \\ \text{gerade}}}^{2T-1} \left\{ \cosh(\varepsilon) - \cos(q_l) \right\} = 2^{-(T-2)} \sinh^2 \left(\varepsilon \frac{T}{2} \right), \quad (4.102)$$

$$\prod_{\substack{l \\ \text{ungerade}}}^{2T-1} \left\{ \cosh(\varepsilon) - \cos(q_l) \right\} = 2^{-(T-2)} \cosh^2 \left(\varepsilon \frac{T}{2} \right); \quad (4.103)$$

$$\text{mit } q_l = \frac{\pi l}{T}, \quad l = 0, 1, 2, \dots, 2T-1. \quad (4.104)$$

Die fermionische Zustandssumme Z_{++}^F (4.86) (aus Darstellung I) läßt sich somit unter Ausnutzung von (2.52) umschreiben zu

$$\begin{aligned} [Z_{++}^F]^2 &= 2^{2L} \cdot \prod_{\substack{k \\ \text{gerade}}}^{2L-1} \sinh^2 \left(\varepsilon_k \frac{T}{2} \right) \\ &= 2^{LT} \cdot \prod_{\substack{k \\ \text{gerade}}}^{2L-1} \prod_{\substack{l \\ \text{gerade}}}^{2T-1} \left\{ \cosh(\varepsilon_k) - \cos(q_l) \right\} \\ &= 2^{LT} \cdot \prod_{\substack{k \\ \text{gerade}}}^{2L-1} \prod_{\substack{l \\ \text{gerade}}}^{2T-1} \left\{ \cosh(m_0) + 1 - \cos(p_k) - \cos(q_l) \right\} \\ &\text{mit } p_k = \frac{\pi k}{L}, \quad k = 0, 1, 2, \dots, 2L-1. \end{aligned}$$

Beim Wurzelziehen muß auf das Vorzeichen geachtet werden; es ist aus (4.86) bekannt:

$$Z_{++}^F = \pm 2^{\frac{LT}{2}} \cdot \prod_{\substack{k \\ \text{gerade}}}^{2L-1} \prod_{\substack{l \\ \text{gerade}}}^{2T-1} \sqrt{\cosh(m_0) + 1 - \cos(p_k) - \cos(q_l)}. \quad (4.105)$$

Das obere Vorzeichen gilt für $\beta < \beta_C$, das untere für $\beta > \beta_C$. Auf analoge Weise erhält man mit (4.102) und (4.103):

$$Z_{+-}^F = 2^{\frac{LT}{2}} \cdot \prod_{\substack{k \\ \text{gerade}}}^{2L-1} \prod_{\substack{l \\ \text{ungerade}}}^{2T-1} \sqrt{\cosh(m_0) + 1 - \cos(p_k) - \cos(q_l)}; \quad (4.106)$$

$$Z_{-+}^F = 2^{\frac{LT}{2}} \cdot \prod_{\substack{k \\ \text{ungerade}}}^{2L-1} \prod_{\substack{l \\ \text{gerade}}}^{2T-1} \sqrt{\cosh(m_0) + 1 - \cos(p_k) - \cos(q_l)}; \quad (4.107)$$

$$Z_{--}^F = 2^{\frac{LT}{2}} \cdot \prod_{\substack{k \\ \text{ungerade}}}^{2L-1} \prod_{\substack{l \\ \text{ungerade}}}^{2T-1} \sqrt{\cosh(m_0) + 1 - \cos(p_k) - \cos(q_l)}. \quad (4.108)$$

Diese Umwandlung auf Doppelprodukte wurde bereits bis auf Randterme diskutiert in [35, 55]. Einen anderen Zugang zu diesen über Grassmann-Integrale findet man in [20].

4.5.2 Doppelproduktdarstellung der $\hat{Z}_{\epsilon_x \epsilon_t}^F$ (Darstellung II)

Analog zu den oben aufgeführten Identitäten (4.102) und (4.103) findet sich:

$$\prod_{\substack{k \\ \text{gerade}}}^{2L-1} \left\{ \cosh(\hat{\varepsilon}) - \cos(p_k) \right\} = 2^{-(L-2)} \sinh^2 \left(\hat{\varepsilon} \frac{L}{2} \right), \quad (4.109)$$

$$\prod_{\substack{k \\ \text{ungerade}}}^{2L-1} \left\{ \cosh(\hat{\varepsilon}) - \cos(p_k) \right\} = 2^{-(L-2)} \cosh^2 \left(\hat{\varepsilon} \frac{L}{2} \right). \quad (4.110)$$

Daraus folgt mit $\hat{\varepsilon}_l$ und q_l (4.104), die sich gemäß (3.29) aus ε_k (2.52) und p_k (2.53) ergeben,

$$\begin{aligned} [\hat{Z}_{++}^F]^2 &= 2^{2T} \cdot \prod_{\substack{l \\ \text{gerade}}}^{2T-1} \sinh^2 \left(\hat{\varepsilon}_l \frac{L}{2} \right) \\ &= 2^{LT} \cdot \prod_{\substack{l \\ \text{gerade}}}^{2T-1} \prod_{\substack{k \\ \text{gerade}}}^{2L-1} \left\{ \cosh(\hat{\varepsilon}_l) - \cos(p_k) \right\} \\ &= 2^{LT} \cdot \prod_{\substack{l \\ \text{gerade}}}^{2T-1} \prod_{\substack{k \\ \text{gerade}}}^{2L-1} \left\{ \cosh(m_0) + 1 - \cos(q_l) - \cos(p_k) \right\}, \end{aligned}$$

was letztlich auf

$$\hat{Z}_{++}^F = \pm 2^{\frac{LT}{2}} \cdot \prod_{\substack{l \\ \text{gerade}}}^{2T-1} \prod_{\substack{k \\ \text{gerade}}}^{2L-1} \sqrt{\cosh(m_0) + 1 - \cos(q_l) - \cos(p_k)} \quad (4.111)$$

4.5. Äquivalenzbeweis von Darstellung I und II

führt, wobei das Vorzeichen dasselbe wie in (4.105) ist.

Mit (4.109) und (4.110) lauten die weiteren Zustandssummen:

$$\hat{Z}_{+-}^F = 2^{\frac{LT}{2}} \cdot \prod_{\substack{l \\ \text{ungerade}}}^{2T-1} \prod_{\substack{k \\ \text{gerade}}}^{2L-1} \sqrt{\cosh(m_0) + 1 - \cos(q_l) - \cos(p_k)}; \quad (4.112)$$

$$\hat{Z}_{-+}^F = 2^{\frac{LT}{2}} \cdot \prod_{\substack{l \\ \text{gerade}}}^{2T-1} \prod_{\substack{k \\ \text{ungerade}}}^{2L-1} \sqrt{\cosh(m_0) + 1 - \cos(q_l) - \cos(p_k)}; \quad (4.113)$$

$$\hat{Z}_{--}^F = 2^{\frac{LT}{2}} \cdot \prod_{\substack{l \\ \text{ungerade}}}^{2T-1} \prod_{\substack{k \\ \text{ungerade}}}^{2L-1} \sqrt{\cosh(m_0) + 1 - \cos(q_l) - \cos(p_k)}. \quad (4.114)$$

Aus dem Vergleich von (4.105)-(4.108) mit (4.111)-(4.114) erkennt man nun unmittelbar:

$$\hat{Z}_{++}^F = Z_{++}^F; \quad \hat{Z}_{+-}^F = Z_{+-}^F;$$

$$\hat{Z}_{-+}^F = Z_{-+}^F; \quad \hat{Z}_{--}^F = Z_{--}^F.$$

Mit (4.82)-(4.85) und (4.94)-(4.97) folgt hieraus für die Spin-Zustandssummen:

$$\hat{Z}_{++} = Z_{++}; \quad \hat{Z}_{+-} = Z_{+-};$$

$$\hat{Z}_{-+} = Z_{-+}; \quad \hat{Z}_{--} = Z_{--}.$$

Über die Doppelproduktdarstellung fermionischer Zustandssummen wurde somit die Äquivalenz von Darstellung I und II bewiesen, und zwar sowohl auf Spin- als auch auf Fermion-Ebene.

Kapitel 5

Berechnung der Energieaufspaltung

Dieses Kapitel widmet sich der Berechnung eines analytischen Ausdrucks für die Energieaufspaltung im zweidimensionalen Ising-Modell bei einer großen Zahl an Freiheitsgraden (großes L). Nach einer Beleuchtung der physikalischen Hintergründe erfolgt die Rechnung mittels einer komplexen Konturintegration entlang eines Schlitzes sowie anschließender Sattelpunktsentwicklung in verschiedenen Näherungsschemata.

Zur Vorbeugung von unerwünschten Singularitäten in nachfolgend auftretenden Funktionen sei die Temperaturvariable β , soweit nicht anders erwähnt, auf den interessierenden Tieftemperatur-Bereich $\beta_C < \beta < \infty$ beschränkt.

5.1 Aufstellung und Eigenschaften der Energieaufspaltung

Der Begriff der Energieaufspaltung ist bereits in Abschnitt 2.2.10 bei der Diskussion des Energiespektrums (Abb. 2.15 - 2.18) gefallen. Als Energielücke der beiden niedrigsten Energiezustände wurde (2.73) gefunden:

$$\Delta E = E_{0-} - E_{0+}.$$

Die Energieaufspaltung tritt aber noch im Zusammenhang mit anderen physikalischen Größen in Erscheinung.

Dazu werde zunächst die Korrelation zweier Spins $s_{t_1 x_0}, s_{t_2 x_0}$ mit $t_2 > t_1$ innerhalb derselben Spalte x_0 betrachtet (Abb. 5.1).

Im Transfermatrixformalismus (Darstellung I, Kap. 2) lautet die Korrelationsfunktion

$$\langle s_{t_2 x_0} s_{t_1 x_0} \rangle = \frac{\text{Sp} [V^{T-t_2} \sigma_{x_0}^z V^{t_2-t_1} \sigma_{x_0}^z V^{t_1}]}{\text{Sp}[V^T]}. \quad (5.1)$$

Durch Einschieben von Energieeigenzuständen erhält man für $T \gg t_2 - t_1$ die führenden Terme [16]

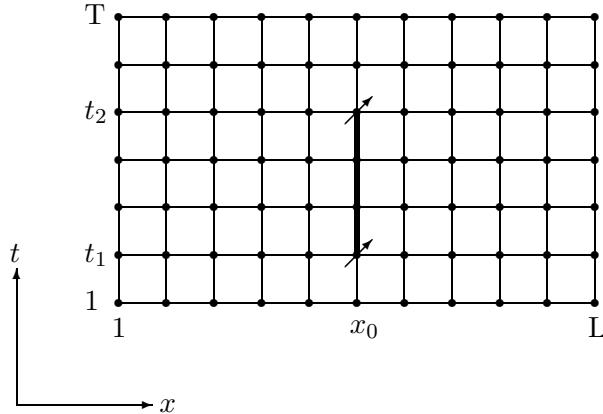


Abbildung 5.1: Spin-Spin-Korrelation im Ising-Gitter

$$\langle s_{t_2 x_0} s_{t_1 x_0} \rangle = \sum_{m \geq 0+} \left| \langle 0+ | \sigma_{x_0}^z | m \rangle \right|^2 \exp \left\{ - (E_m - E_{0+})(t_2 - t_1) \right\}. \quad (5.2)$$

Im endlichen Volumen ist der Erwartungswert im Grundzustand gegeben durch $\langle 0+ | \sigma_{x_0}^z | 0+ \rangle$. Da $|0+\rangle$ symmetrisch, $\sigma_{x_0}^z$ jedoch antisymmetrisch bezüglich einer Spineinkehr ist, verschwindet dieser aus Symmetriegründen; zu (5.2) tragen folglich nur die Terme bei, in denen m einen antisymmetrischen Zustand $m = n-$ kennzeichnet.

Für große Abstände $t_2 - t_1 \gg 1$ dominiert dementsprechend der Term mit $m = 0-$, so daß sich das Verhalten

$$\langle s_{t_2 x_0} s_{t_1 x_0} \rangle \sim \text{const.}_1 \cdot \exp \left\{ - \Delta E (t_2 - t_1) \right\} \quad (5.3)$$

mit ΔE (2.73) ergibt. Man erkennt nun unmittelbar den Zusammenhang

$$\Delta E = \frac{1}{\xi_t}. \quad (5.4)$$

Die Energieaufspaltung entspricht also dem Inversen einer Korrelationslänge ξ_t , die als Tunnel-Korrelationslänge interpretiert wird [10, 24].

Im Limes unendlich vieler Freiheitsgrade $L \rightarrow \infty$ geht die Energieaufspaltung gegen Null (siehe 2.2.10). In diesem Fall wird der bislang führende Term (5.3) zu einer Konstanten. Um im unendlichen Volumen die sog. Bulk-Korrelationslänge¹ abzulesen, wird in (5.2) die nächstgrößere Energiedifferenz als dominierender Term miteinbezogen:

$$\langle s_{t_2 x_0} s_{t_1 x_0} \rangle \sim \text{const.}_1 + \text{const.}_2 \cdot \exp \left\{ - (E_{2-;k=0,l=2} - E_{0+}) (t_2 - t_1) \right\}.$$

Für $L \rightarrow \infty$ gilt

$$E_{2-;k=0,l=2} - E_{0+} \xrightarrow{L \rightarrow \infty} E_{2-;k=0,l=2} - E_{0-} = |\varepsilon_0| + \varepsilon_2 \xrightarrow{L \rightarrow \infty} 2m_0$$

¹Die deutsche Übersetzung „Volumen-Korrelationslänge“ trägt der Tatsache Rechnung, daß diese für unendliches Volumen definiert ist.

und somit

$$\langle s_{t_2} x_0 \ s_{t_1} x_0 \rangle \sim \text{const.}_1 + \text{const.}_2 \cdot \exp \left\{ -2 m_0 (t_2 - t_1) \right\}. \quad (5.5)$$

Der konstante Term $\text{const.}_1 = |\langle 0+ | \sigma_{x_0}^z | 0- \rangle|^2$ wird durch die Einführung der verbundenen Korrelationsfunktion

$$\langle s_{t_2} x_0 \ s_{t_1} x_0 \rangle_C = \langle s_{t_2} x_0 \ s_{t_1} x_0 \rangle - \langle s_{t_2} x_0 \rangle \langle s_{t_1} x_0 \rangle \quad (5.6)$$

entfernt, indem die bei unendlichem Volumen nicht-verschwindenden Erwartungswerte im Grundzustand abgezogen werden. Die Grundzustände $|+\rangle$ und $|-\rangle$ des unendlichen Volumens gehen hierbei aus der Überlagerung von $|0+\rangle$ und $|0-\rangle$ hervor:

$$\begin{aligned} |+\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}} (|0+\rangle + |0-\rangle), \\ |-\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}} (|0+\rangle - |0-\rangle). \end{aligned}$$

Bei $|+\rangle$ und $|-\rangle$ handelt es sich um (energetisch entartete) Extremalzustände, die einer größtmöglichen Magnetisierung in beiden Vorzeichen Rechnung tragen (man vergleiche mit feldtheoretischen Ansätzen [56], siehe auch Einleitung).

Die Berechnung von $\langle s_{t_{1/2}} x_0 \rangle$ in diesen beiden Zuständen ergibt

$$\begin{aligned} \langle + | \sigma_{x_0}^z | + \rangle &= + \langle 0+ | \sigma_{x_0}^z | 0- \rangle, \\ \langle - | \sigma_{x_0}^z | - \rangle &= - \langle 0+ | \sigma_{x_0}^z | 0- \rangle, \end{aligned}$$

wobei benutzt wurde, daß die Matrixelemente reell sind.

Damit erhält man jeweils

$$\langle s_{t_1} x_0 \rangle \langle s_{t_2} x_0 \rangle = \text{const.}_1$$

und somit

$$\langle s_{t_2} x_0 \ s_{t_1} x_0 \rangle_C \sim \text{const.}_2 \cdot \exp \left\{ -2 m_0 (t_2 - t_1) \right\}.$$

Die Bulk-Korrelationslänge ξ läßt sich nun ablesen zu

$$\frac{1}{\xi} = 2 m_0, \quad (5.7)$$

was die Bezeichnung von $m_0 = 2|\beta - \tilde{\beta}|$ im Sinne einer Massenlücke rechtfertigt (der Faktor 2 in (5.7) tritt oberhalb der kritischen Temperatur nicht auf, wie an (2.74) zu sehen ist). Wie gewohnt divergiert die Bulk-Korrelationslänge ξ am kritischen Punkt $\beta \rightarrow \beta_C$.

Der Zusammenhang der Energieaufspaltung mit Grenzflächen wird einsichtig über die Zustandssummen bei periodischen und antiperiodischen Randbedingungen.

Dazu betrachte man in Abb. 5.2 eine Grenzfläche senkrecht zur t -Richtung, die zwei Domänen unterschiedlicher Spinausrichtung trenne.

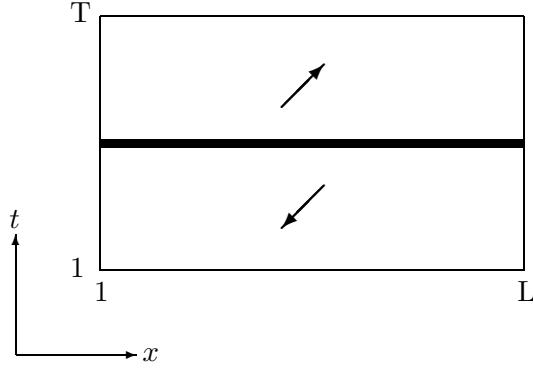


Abbildung 5.2: Grenzfläche senkrecht zur t -Richtung

Die entsprechenden Zustandssummen Z'_{+-} (3.23) und Z'_{++} (3.21), die zur Erfüllung ihrer jeweiligen Randbedingungen eine ungerade sowie gerade Anzahl an Grenzflächen enthalten können, wurden in Abschnitt 3.1.3 aufgestellt (Darstellung I). Für $T \gg 1$ lauten diese über die Energien eigenwerte ausgedrückt:

$$\begin{aligned} Z'_{+-} &= \exp\{-E_{0+} T\} - \exp\{-E_{0-} T\} + O(\exp\{-E_{2\pm} T\}), \\ Z'_{++} &= \exp\{-E_{0+} T\} + \exp\{-E_{0-} T\} + O(\exp\{-E_{2\pm} T\}). \end{aligned}$$

Für deren Verhältnis folgt somit

$$\frac{Z'_{+-}}{Z'_{++}} = \frac{Z_{+-}}{Z_{++}} \sim \frac{1 - \exp\{-\Delta E \cdot T\}}{1 + \exp\{-\Delta E \cdot T\}} \sim \frac{\sum_k^{\text{ungerade}} \frac{1}{k!} \left(\frac{\Delta E \cdot T}{2}\right)^k}{\sum_k^{\text{gerade}} \frac{1}{k!} \left(\frac{\Delta E \cdot T}{2}\right)^k},$$

was für genügend große L, T wegen $\Delta E \cdot T \ll 1$ auf

$$\frac{Z_{+-}}{Z_{++}} \sim \frac{1}{2} \Delta E \cdot T \quad (5.8)$$

führt. Dies entspricht der Mitnahme der niedrigsten ($k = 0$ und $k = 1$) Grenzflächenbeiträge und somit der in Abb. 5.2 dargestellten Situation einer einzelnen Grenzfläche (vgl. Diskussion von Multikink-Beiträgen in [56]).

Über die Differenz der (reduzierten) Freien Energien F_{+-} und F_{++} ($F = -\ln Z$) lässt sich die Freie Energie der Grenzfläche definieren:

$$F_{Grenz} = F_{+-} - F_{++} + \ln T.$$

Der letzte Term berücksichtigt die T Anordnungsmöglichkeiten der Grenzfläche im Gitter. Damit gelangt man zur Definition der (reduzierten) Grenzflächenspannung [23, 24]

$$\sigma = \lim_{T \rightarrow \infty} \lim_{L \rightarrow \infty} \frac{F_{Grenz}}{L}. \quad (5.9)$$

als Freie Energie der Grenzfläche pro an der Grenzfläche beteiligten Gitterpunkten. Mit (5.8) folgt

$$\sigma = \lim_{L \rightarrow \infty} \left(-\frac{1}{L} \ln \Delta E \right). \quad (5.10)$$

Hieraus lässt sich bei großen L folgende Abhängigkeit der Energieaufspaltung von der Anzahl an Freiheitsgraden, d.h. der Gittergröße, erkennen:

$$\Delta E \sim \exp\{-L\sigma\}. \quad (5.11)$$

Eventuelle Vorfaktoren, die lediglich potenzartig von L abhängen, werden durch die Limesbildung unterdrückt.

Im Rahmen dieser Arbeit und speziell in diesem Kapitel wird (5.11) näher untersucht; insbesondere wird der Vorfaktor berechnet, der sich aus der eben aufgeführten Überlegung noch nicht ergibt. Diesen erhält man durch Berechnung der Energieaufspaltung ΔE als Lücke im Spektrum (2.73) aus der bisher gewonnenen Kenntnis über die Eigenwerte, wie nachfolgend zu sehen ist. Ich folge dabei Privman und Fisher [25].

5.2 Darstellung durch Fourierkoeffizienten

Die Energieaufspaltung (2.73) lautet mit (2.71) und (2.72) ausgeschrieben (die ε_{2k+1} mit ungeradem Index sind stets positiv; ein Betragsstrich ist also nicht vornötigen, kann aber nach Bedarf gesetzt werden):

$$\Delta E = \frac{1}{2} \left\{ \sum_{k=0}^{L-1} \varepsilon_{2k+1} - \sum_{k=0}^{L-1} |\varepsilon_{2k}| \right\}. \quad (5.12)$$

Aufgrund von $\lim_{L \rightarrow \infty} \varepsilon_{2k+1} = \lim_{L \rightarrow \infty} |\varepsilon_{2k}|$ lässt sich bereits der Trend $\lim_{L \rightarrow \infty} \Delta E = 0$ ablesen. Ein analytischer Ausdruck, der diesen Limes beschreibt, lässt sich aus der getrennten Limitenbildung beider Summen in (5.12) jedoch nicht gewinnen. Daher wird (5.12) im Folgenden in eine einzelne Summe (positiver Summanden) umgeschrieben; dies gelingt durch die Entwicklung in eine Fourierreihe. Zu diesem Zweck wird mittels der für große L quasikontinuierlichen Variablen $x = \frac{k}{L}$ die Funktion

$$|\varepsilon(x)| = +\text{Arcosh}\{\cosh(m_0) + 1 - \cos(\pi x)\} \quad (5.13)$$

definiert (man vergleiche mit ε_k (2.52); die Definition (5.13) dient u.a. einer genaueren Spezifikation des Arguments). Deren Periode beträgt 2 (siehe Abb. 2.6). Damit ist

$$\Delta E = \frac{1}{2} \left\{ \sum_{k=0}^{L-1} \varepsilon\left(\frac{2k+1}{L}\right) - \sum_{k=0}^{L-1} \left| \varepsilon\left(\frac{2k}{L}\right) \right| \right\}. \quad (5.14)$$

Die komplexen Fourier-Entwicklungen lauten

$$\begin{aligned} \left| \varepsilon\left(\frac{2k}{L}\right) \right| &= \sum_{n=-\infty}^{+\infty} c'_n \exp\left\{i\pi n \frac{2k}{L}\right\}, \\ \varepsilon\left(\frac{2k+1}{L}\right) &= \sum_{n=-\infty}^{+\infty} c'_n \exp\left\{i\pi n \frac{2k+1}{L}\right\} \end{aligned}$$

mit denselben Fourierkoeffizienten c'_n :

$$c'_n = \frac{1}{2} \int_{-1}^{+1} |\varepsilon(x)| \exp\{-i\pi n x\} dx.$$

Mit der im Anhang B.1 hergeleiteten Identität

$$\sum_{k=0}^{L-1} \exp\left\{i\pi n \frac{2k}{L}\right\} = \begin{cases} L & \text{für } n = sL, \\ 0 & \text{für } n \neq sL, \end{cases} \quad (5.15)$$

mit $L \in \mathbb{N}, n, s \in \mathbb{Z}$

folgt:

$$\begin{aligned} \sum_{k=0}^{L-1} \left| \varepsilon\left(\frac{2k}{L}\right) \right| &= \sum_{n=-\infty}^{+\infty} c'_n \sum_{k=0}^{L-1} \exp\left\{i\pi n \frac{2k}{L}\right\} = L \sum_{s \in \mathbb{Z}} c'_{s \cdot L}; \\ \sum_{k=0}^{L-1} \varepsilon\left(\frac{2k+1}{L}\right) &= L \sum_{s \in \mathbb{Z}} (-1)^s c'_{s \cdot L}. \end{aligned}$$

Damit erhält man für die Energieaufspaltung (5.14)

$$\Delta E = -L \sum_{j=-\infty}^{+\infty} c'_{(2j+1)L}.$$

Durch die Koeffizienten der reellen Fourierreihe

$$c_n = \int_{-1}^{+1} |\varepsilon(x)| \cos(n\pi x) dx$$

ausgedrückt lautet diese

$$\Delta E = -L \sum_{j=0}^{\infty} c_{(2j+1)L}. \quad (5.16)$$

Man vergleiche mit Privman und Fisher [25].

(5.16) ist Ausgangspunkt der weiteren Rechnung. Insbesondere ist

$$c_L = \int_{-1}^{+1} |\varepsilon(x)| \cos(L\pi x) dx. \quad (5.17)$$

Der folgende Abschnitt widmet sich der Berechnung von c_L und zeigt, daß die restlichen Koeffizienten rasch abfallen.

5.3 Berechnung des Integrals c_L

Der in c_L (5.17) enthaltene kompliziertere Ausdruck $|\varepsilon(x)|$ stellt eine Quelle von Schwierigkeiten dar. Es wird zunächst eine Berechnungsmethode detailliert vorgestellt, und anschließend werden weitere Varianten aufgezeigt.

Eine nützliche Umformung von (5.13) ist

$$|\varepsilon(x)| = \ln \left[\cosh(m_0) + 1 - \cos(\pi x) + \sqrt{[\cosh(m_0) + 1 - \cos(\pi x)]^2 - 1} \right]. \quad (5.18)$$

5.3.1 Partielle Integration

Aufgrund des Hinweises im Artikel von Privman und Fisher [25] wird die Berechnung mit einer partiellen Integration beginnend durchgeführt, wobei der Randterm wegfällt:

$$c_L = -\frac{1}{L} \operatorname{Im} \left[\int_{-1}^{+1} \frac{\sin(\pi x)}{\sqrt{[\cosh(m_0) + 1 - \cos(\pi x)]^2 - 1}} \exp(iL\pi x) dx \right]. \quad (5.19)$$

Das Augenmerk richtet sich daher auf das Integral

$$I = \int_{-1}^{+1} h(x) \exp(iL\pi x) dx \quad (5.20)$$

$$\text{mit } h(x) = \frac{\sin(\pi x)}{\sqrt{[\cosh(m_0) + 1 - \cos(\pi x)]^2 - 1}}, \quad (5.21)$$

welches analytisch in die komplexe Ebene fortgesetzt wird.

5.3.2 Auffinden der Verzweigungspunkte und Schlitze von $h(z)$

$h(z)$ aus (5.21) mit $z \in \mathbb{C}$ enthält einen komplexen Wurzelausdruck. Aus der Funktionentheorie ist wohlbekannt [57], daß die komplexe Wurzel zwecks Ausschluß von Mehrdeutigkeiten auf einer geschlitzten Ebene definiert wird; auf dieser ist sie eindeutig und holomorph. Die Schlitze sind passend gewählte Verbindungslien von Verzweigungspunkten genannten Nichtanalytizitätsstellen. Für die vorliegende Funktion $h(z)$ in (5.21) finden sich die vier Verzweigungspunkte

$$z_1 = +i \frac{m_0}{\pi}, \quad z_2 = -i \frac{m_0}{\pi},$$

$$z_3 = +i \frac{2(\beta + \tilde{\beta})}{\pi}, \quad z_4 = -i \frac{2(\beta + \tilde{\beta})}{\pi},$$

$$\text{mit } |z_{1/2}| \leq |z_{3/4}|$$

sowie die in Abb. 5.3 gezeigten endlichen Schlitze.

Die Rechnung hierzu ist Anhang C zu entnehmen.

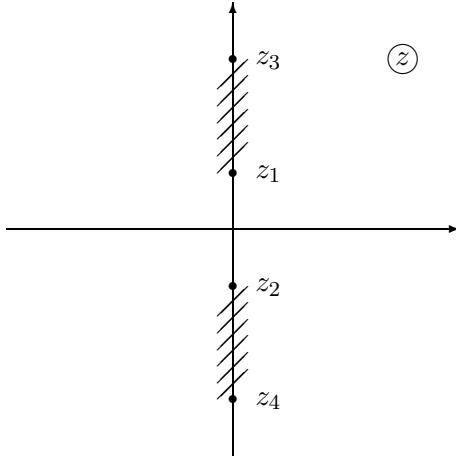


Abbildung 5.3: Lage der Schlitze von $h(z)$ in der z -Ebene

5.3.3 Integration entlang des Schlitzes

Zur Berechnung des Integrals (5.20) wird nun der in Abb. 5.4 dargestellte Integrationsweg $\Gamma_2 - \Gamma_7$ in der oberen Halbebene eingeschlagen. Der ursprüngliche Weg Γ_1 verläuft auf der reellen Achse. Eine Rechnung in der unteren Halbebene verläuft analog und liefert dasselbe Ergebnis.

In Anhang D wird durch explizite Parametrisierung gezeigt, daß sich die Integrale über die Wege Γ_2 und Γ_7 aufgrund der Periodizität von $h(x)$ gegenseitig aufheben, und daß die Integrale über Γ_3 und Γ_6 im Limes $d \rightarrow \infty$ jeweils keinen Beitrag liefern. Diese Wege sind in Abb. 5.4 gestrichelt eingezeichnet.

Im Limes $\eta \rightarrow 0$, $d \rightarrow \infty$ verbleibt somit die Integration längs des linken und rechten Schlitz-Ufers, Gl. (D.1):

$$I = i \int_{m_0/\pi}^{\infty} \lim_{\eta \rightarrow 0} \{h(is + \eta) - h(is - \eta)\} \exp(-L\pi s) ds .$$

Aufgrund des Schlitzes ist das Argument von $h(z)$ eindeutig durch Nebenbedingungen festgelegt. Dies hat zur Folge, daß bei der Annäherung an dessen gegenüberliegende Ufer das Argument einen Sprung um 2π macht [57]; demzufolge tritt eine Diskontinuität auf, die über

$$\text{dis}_h(s) = \lim_{\eta \rightarrow 0} \{h(is + \eta) - h(is - \eta)\} \quad (5.22)$$

definiert wird. Da diese lediglich im Bereich des Schlitzes von Null verschieden ist, folgt

$$I = i \int_{m_0/\pi}^{2(\beta + \tilde{\beta})/\pi} \text{dis}_h(s) \exp(-L\pi s) ds .$$

Man integriert somit den Schlitz hinauf über die Diskontinuität, multipliziert mit einer abfallenden Exponentialfunktion, wie in Abb. 5.5 veranschaulicht wird.

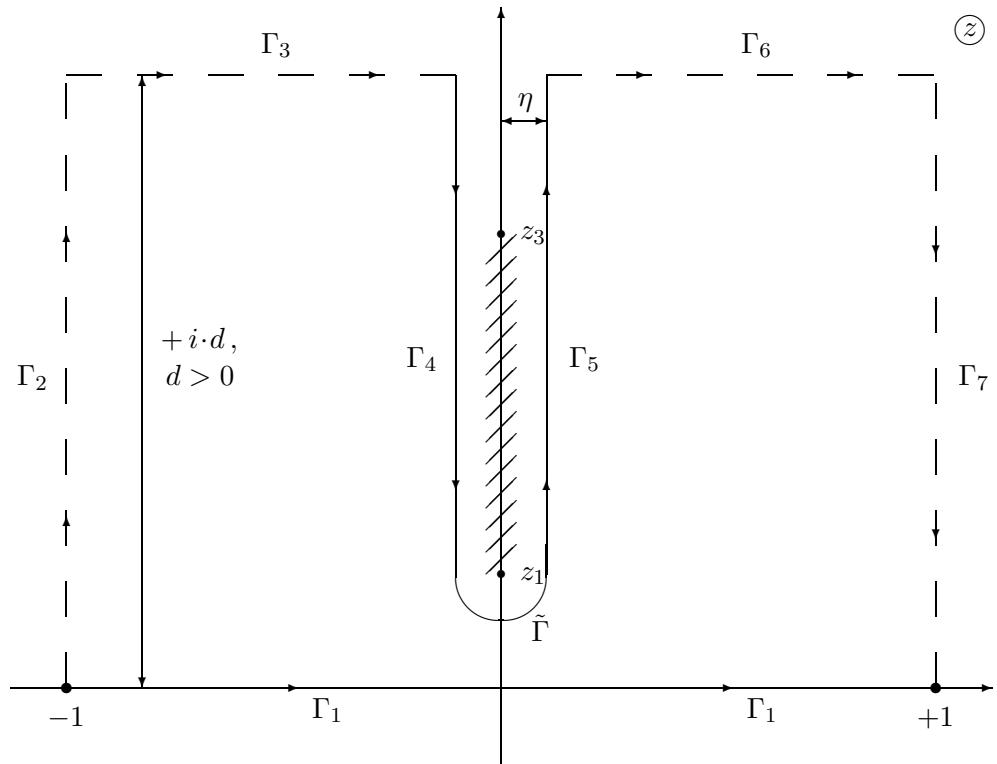


Abbildung 5.4: Integrationsweg in der komplexen Ebene ($\eta \geq 0$)

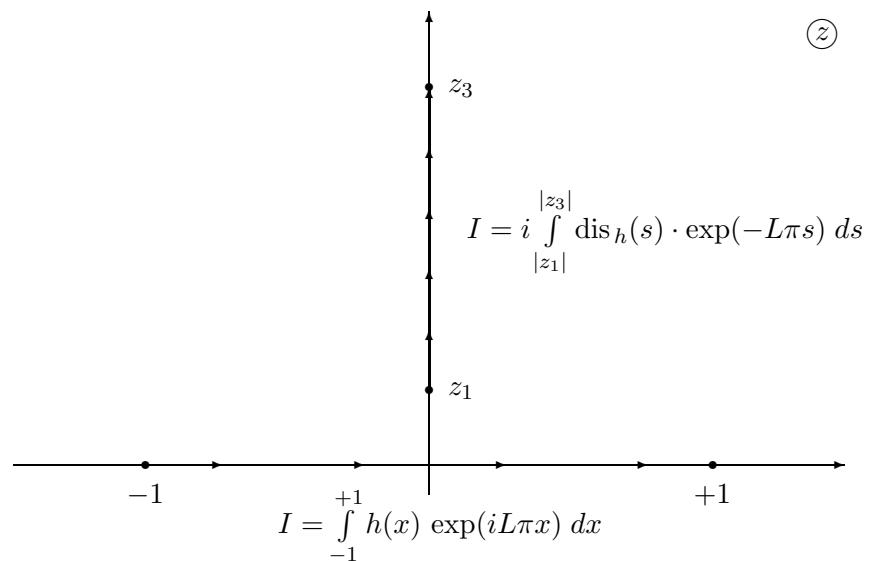


Abbildung 5.5: Integration über Diskontinuität

5.3. Berechnung des Integrals c_L

Durch die Substitution $s = r + \frac{m_0}{\pi}$ wird das untere Schlitzende auf Null gesetzt:

$$I = \exp(-L m_0) \cdot i \int_0^a \text{dis}_h^{(1)}(r) \cdot \exp(-L\pi r) dr \quad (5.23)$$

$$\text{mit } \text{dis}_h^{(1)}(r) = \lim_{\eta \rightarrow 0} \left\{ h\left(ir + i\frac{m_0}{\pi} + \eta\right) - h\left(ir + i\frac{m_0}{\pi} - \eta\right) \right\} \quad (5.24)$$

$$\text{und der Schlitzlänge } a = |z_3| - |z_1|. \quad (5.25)$$

An (5.23) lässt sich bereits ein exponentiell abfallender Term $\exp(-L m_0)$ ableSEN, wie er prinzipiell nach (5.11) zu erwarten war; das verbleibende Integral

$$i \int_0^a \text{dis}_h^{(1)}(r) \cdot \exp(-L\pi r) dr \quad (5.26)$$

wird, wie sogleich zu sehen ist, die gesuchten Vorfaktoren enthalten, die potenzartig von L abhängen.

Wie in Unterkapitel 5.1 erörtert wurde, ist ein Ausdruck für große L von Interesse. Damit lässt sich zum einen das Verhalten der weiteren Fourierkoeffizienten in (5.16) absehen; bereits $c_{3L} \sim \exp(-3 L m_0)$ fällt für $L \gg 1$ deutlich schneller ab (vgl. [25]):

$$\Delta E = -L c_L \left[1 + O(\exp(-2 L m_0)) \right]. \quad (5.27)$$

Die Energieaufspaltung ergibt sich dann nach (5.19)-(5.21) zu

$$\Delta E = \text{Im}\{I\} \left[1 + O(\exp(-2 L m_0)) \right]. \quad (5.28)$$

Zum anderen liefert es die Anleitung zur weiteren Berechnung des Integrals (5.26): Im Integranden dominiert für $L \gg 1$ offensichtlich der $\exp(-L\pi r)$ -Term, der nur für kleine r nennenswerte Beiträge liefert. Die Diskontinuität $\text{dis}_h^{(1)}(r)$ (5.24) wird daher im Sinne einer Sattelpunktsentwicklung für $r \ll 1$ genähert werden. Die abschließende Berechnung der hierdurch auftretenden Integrale wird durch folgende Abschätzung erleichtert:

$$\begin{aligned} & \int_0^a \text{dis}_h^{(1)}(r) \cdot \exp(-L\pi r) dr = \\ &= \int_0^\infty \text{dis}_h^{(1)}(r) \cdot \exp(-L\pi r) dr - \int_a^\infty \text{dis}_h^{(1)}(r) \cdot \exp(-L\pi r) dr \\ &\stackrel{r=t+a}{=} \int_0^\infty \text{dis}_h^{(1)}(r) \cdot \exp(-L\pi r) dr - \exp(-L\pi a) \cdot \int_0^\infty \text{dis}_h^{(2)}(t) \cdot \exp(-L\pi t) dt \\ &= \int_0^\infty \text{dis}_h^{(1)}(r) \cdot \exp(-L\pi r) dr \left[1 + O(\exp(-L\pi a)) \right]. \end{aligned} \quad (5.29)$$

5.3.4 Berechnung der Diskontinuität

Es sind die in (5.24) enthaltenen Limiten zu berechnen.

Begonnen wird mit

$$\begin{aligned} \lim_{\eta \rightarrow 0} h(ir + i\frac{m_0}{\pi} + \eta) &= \\ \stackrel{(5.21)}{=} &\frac{\lim_{\eta \rightarrow 0} \sin(i\pi r + im_0 + \pi\eta)}{\lim_{\eta \rightarrow 0} \sqrt{[\cosh(m_0) + 1 - \cos(i\pi r + im_0 + \pi\eta)]^2 - 1}} \\ &= \frac{i \sinh(\pi r + m_0)}{\lim_{\eta \rightarrow 0} \sqrt{w_+^2 - 1}}. \end{aligned}$$

Um den Limes auszuführen, wird zur Darstellung der Wurzel die Definition der allgemeinen Potenz im Komplexen verwendet [57]:

$$\lim_{\eta \rightarrow 0} \sqrt{w_+^2 - 1} = \lim_{\eta \rightarrow 0} \exp \left[\frac{1}{2} \ln |w_+^2 - 1| + \frac{1}{2} i \varphi_+ \right]. \quad (5.30)$$

Das Argument $\varphi_+ = \arg(w_+^2 - 1) = \arg(w_+ + 1) + \arg(w_+ - 1)$ ist definiert auf dem Hauptzweig $\varphi \in [-\pi, +\pi]$ in der z -Ebene.

Die Trennung von Real- und Imaginärteil ergibt

$$\lim_{\eta \rightarrow 0} \varphi_+ = \arctan(0) = +\pi;$$

von den möglichen Lösungen wurde $+\pi$ ausgewählt, da am rechten Ufer der imaginären Achse in der z -Ebene $\arg(w_+ \pm 1) = +\frac{1}{2}\pi$ gilt (vgl. Anhang C).

Für den Betrag in (5.30) errechnet sich:

$$\begin{aligned} \lim_{\eta \rightarrow 0} |w_+^2 - 1| &= \left| [\cosh(m_0) + 1 - \cosh(\pi r + m_0)]^2 - 1 \right| \\ &= \left| [1 - 2 \sinh(\frac{\pi r}{2} + m_0) \cdot \sinh(\frac{\pi r}{2})]^2 - 1 \right| \\ &= 4 \sinh(\frac{\pi r}{2} + m_0) \cdot \sinh(\frac{\pi r}{2}) \left| 1 - \sinh(\frac{\pi r}{2} + m_0) \cdot \sinh(\frac{\pi r}{2}) \right| \\ &= 4 \sinh(\frac{\pi r}{2} + m_0) \cdot \sinh(\frac{\pi r}{2}) \left[1 - \sinh(\frac{\pi r}{2} + m_0) \cdot \sinh(\frac{\pi r}{2}) \right]. \end{aligned}$$

Der letzte Schritt folgt aus der Beschränkung auf kleine r , die im vorherigen Abschnitt angekündigt wurde (m_0 wird hierzu als nicht übermäßig groß angenommen).

Damit lautet

$$\begin{aligned} \lim_{\eta \rightarrow 0} h(ir + i\frac{m_0}{\pi} + \eta) &= \\ &= \frac{1}{2 \sqrt{\sinh(\frac{\pi r}{2})}} \cdot \frac{\sinh(\pi r + m_0)}{\sqrt{\sinh(\frac{\pi r}{2} + m_0) [1 - \sinh(\frac{\pi r}{2} + m_0) \cdot \sinh(\frac{\pi r}{2})]}}. \end{aligned}$$

Die Berechnung von

$$\lim_{\eta \rightarrow 0} h\left(ir + i\frac{m_0}{\pi} - \eta\right) = \frac{i \sinh(\pi r + m_0)}{\lim_{\eta \rightarrow 0} \sqrt{w_-^2 - 1}}$$

erfolgt wegen $\lim_{\eta \rightarrow 0} |w_-^2 - 1| = \lim_{\eta \rightarrow 0} |w_+^2 - 1|$ genauso bis auf die Bestimmung des Winkels φ_- : Am linken Ufer der imaginären Achse gilt

$$\lim_{\eta \rightarrow 0} \varphi_- = \arctan(0) = -\pi,$$

da das Argument φ am Schlitz um 2π springt. Oberhalb des Schlitzes findet dieser Sprung nicht mehr statt, und die Diskontinuität verschwindet.

Somit ist

$$\lim_{\eta \rightarrow 0} h\left(ir + i\frac{m_0}{\pi} - \eta\right) = -\lim_{\eta \rightarrow 0} h\left(ir + i\frac{m_0}{\pi} + \eta\right),$$

und es folgt für die Diskontinuität (5.24):

$$\text{dis}_h^{(1)}(r) = \frac{1}{\sqrt{\sinh\left(\frac{\pi r}{2}\right)}} \cdot \frac{\sinh(\pi r + m_0)}{\sqrt{\sinh\left(\frac{\pi r}{2} + m_0\right)[1 - \sinh\left(\frac{\pi r}{2} + m_0\right) \cdot \sinh\left(\frac{\pi r}{2}\right)]}}. \quad (5.31)$$

5.3.5 Sattelpunktsentwicklung

Hierzu wird die soeben ausgerechnete Diskontinuität $\text{dis}_h^{(1)}(r)$ (5.31) für $r \ll 1$ näherungsweise nach Taylor entwickelt. Dies kann allerdings wegen des Terms $\frac{1}{\sqrt{\sinh\left(\frac{\pi r}{2}\right)}}$ nicht direkt erfolgen; dieser Ausdruck wird separat behandelt:

$$\begin{aligned} \frac{1}{\sqrt{\sinh\left(\frac{\pi r}{2}\right)}} &= \frac{1}{\sqrt{\frac{\pi r}{2} + \frac{1}{3!} \left(\frac{\pi r}{2}\right)^3 + O(r^5)}} = \frac{1}{\sqrt{r}} \cdot \frac{1}{\sqrt{\frac{\pi}{2} + \frac{1}{3!} \left(\frac{\pi}{2}\right)^3 r^2 + O(r^4)}} \\ &= \frac{1}{\sqrt{r}} \left[\sqrt{\frac{2}{\pi}} - \frac{1}{2} \frac{1}{3!} \left(\frac{\pi}{2}\right)^{3/2} \cdot r^2 + O(r^4) \right] \\ &= \sqrt{\frac{2}{\pi}} \frac{1}{\sqrt{r}} - \frac{1}{24\sqrt{2}} \pi^{3/2} \cdot r^{3/2} + O(r^{7/2}). \end{aligned}$$

Der zweite in $\text{dis}_h^{(1)}(r)$ (5.31) enthaltene Ausdruck kann ganz gewöhnlich nach Taylor entwickelt werden.

Die Entwicklung des Gesamtausdrucks (5.31) ergibt sich somit aus dem Produkt der Taylorentwicklungen beider Teilausdrücke, die bis zur Ordnung $O(r^{3/2})$ angegeben wird:

$$\begin{aligned}
 \text{dis}_h^{(1)}(r) &= \left[\sqrt{\frac{2}{\pi}} \frac{1}{\sqrt{r}} - \frac{1}{24\sqrt{2}} \pi^{3/2} \cdot r^{3/2} + O(r^{7/2}) \right] \cdot \\
 &\quad \cdot \left[\sqrt{\sinh(m_0)} + \frac{\pi}{4} \left(\sinh^{3/2}(m_0) + \frac{3 \cosh(m_0)}{\sqrt{\sinh(m_0)}} \right) \cdot r \right. \\
 &\quad + \frac{\pi^2}{16} \left(\frac{3}{2} \sinh^{5/2}(m_0) + 5 \cosh(m_0) \sqrt{\sinh(m_0)} + \right. \\
 &\quad \left. \left. + 7 \sqrt{\sinh(m_0)} - \frac{5}{2} \frac{\cosh^2(m_0)}{\sinh^{3/2}(m_0)} \right) \cdot r^2 + O(r^3) \right] \\
 \Rightarrow \text{dis}_h^{(1)}(r) &= \sqrt{\frac{2 \sinh(m_0)}{\pi}} \cdot \frac{1}{\sqrt{r}} \\
 &\quad + \frac{\sqrt{\pi}}{2\sqrt{2}} \left(\sinh^{3/2}(m_0) + \frac{3 \cosh(m_0)}{\sqrt{\sinh(m_0)}} \right) \cdot \sqrt{r} \\
 &\quad + \frac{\pi^{3/2}}{2\sqrt{2}} \left(\frac{3}{8} \sinh^{5/2}(m_0) + \frac{5}{4} \cosh(m_0) \sqrt{\sinh(m_0)} + \right. \\
 &\quad \left. + \frac{5}{3} \sqrt{\sinh(m_0)} - \frac{5}{8} \frac{\cosh^2(m_0)}{\sinh^{3/2}(m_0)} \right) \cdot r^{3/2} \\
 &\quad + O(r^{5/2}).
 \end{aligned}$$

Während die niedrigeren Ordnungen $O(\frac{1}{\sqrt{r}})$ und $O(\sqrt{r})$ aus einer einzigen Quelle stammen, entsteht die Ordnung $O(r^{3/2})$ aus zwei Quellen: Zum einen aus dem Produkt $O(\frac{1}{\sqrt{r}}) \cdot O(r^2)$, zum anderen aus $O(r^{3/2}) \cdot O(r^0)$.

Das Einsetzen dieser Entwicklung in das Integral

$$\int_0^\infty \text{dis}_h^{(1)}(r) \cdot \exp(-L\pi r) dr$$

führt direkt auf Gammafunktionen (Eulersche Integrale zweiter Gattung); sie sind in Anhang E aufgeführt.

Unter Berücksichtigung der Abschätzung (5.29) erhält man somit das Ergebnis für das gesuchte Integral I (5.23) und damit nach (5.28) auch für die Energieaufspaltung ΔE :

$$\begin{aligned}
 \Delta E &= \exp(-L m_0) \int_0^\infty \text{dis}_h^{(1)}(r) \cdot \exp(-L\pi r) dr \\
 &\quad \cdot [1 + O(\exp(-L\pi a))] [1 + O(\exp(-2 L m_0))].
 \end{aligned}$$

5.3.6 Ergebnis für die Energieaufspaltung ΔE

Unter den in L auftretenden Ordnungen fallen die aus den Abschätzungen (5.29) und (5.27) stammenden Ordnungen $O(\exp(-L\pi a))$ und $O(\exp(-2Lm_0))$ für $L \gg 1$ nur noch unwesentlich ins Gewicht, so daß das Ergebnis für die Energieaufspaltung ΔE lautet:

$$\begin{aligned} \Delta E = & \exp(-Lm_0) \left[\sqrt{\frac{2 \sinh(m_0)}{\pi}} \cdot \frac{1}{\sqrt{L}} + a_1 \frac{1}{L^{3/2}} + a_2 \frac{1}{L^{5/2}} + \right. \\ & \left. + O\left(\frac{1}{L^{7/2}}\right) \right] \left[1 + O(\exp(-L\pi a)) + O(\exp(-2Lm_0)) \right] \end{aligned} \quad (5.32)$$

$$\text{mit } a_1 = \frac{1}{4\sqrt{2\pi}} \left(\sinh^{3/2}(m_0) + \frac{3 \cosh(m_0)}{\sqrt{\sinh(m_0)}} \right) \quad (5.33)$$

$$\begin{aligned} \text{und } a_2 = & \frac{1}{8\sqrt{2\pi}} \left(\frac{9}{8} \sinh^{5/2}(m_0) + \frac{15}{4} \cosh(m_0) \sqrt{\sinh(m_0)} + \right. \\ & \left. + 5 \sqrt{\sinh(m_0)} - \frac{15}{8} \frac{\cosh^2(m_0)}{\sinh^{3/2}(m_0)} \right). \end{aligned} \quad (5.34)$$

Diese Formel für die Energieaufspaltung enthält den gesuchten Vorfaktor, der eine L -Abhängigkeit zeigt. Für den $O(\frac{1}{\sqrt{L}})$ -Term besteht Übereinstimmung mit den Ergebnissen von Privman und Fisher [25], wobei hier noch die nächsten beiden Ordnungen $O(\frac{1}{L^{3/2}})$ und $O(\frac{1}{L^{5/2}})$ explizit angegeben sind.

An (5.32) läßt sich nun ablesen, wie die Energieaufspaltung kontinuierlich mit wachsender Zahl an Freiheitsgraden gegen Null geht.

5.3.7 Ergebnis für die Grenzflächenspannung σ

Für die Grenzflächenspannung σ , definiert durch die Freie Energie der Grenzfläche pro Gitterpunkt (Gl. (5.9)), wurde bereits mit Gl. (5.10) in Abschnitt 5.1 folgender Zusammenhang mit der Energieaufspaltung ΔE festgestellt:

$$\sigma = \lim_{L \rightarrow \infty} \left(-\frac{1}{L} \ln \Delta E \right).$$

Durch Einsetzen des oben erhaltenen Ergebnisses (5.32) erhält man

$$\begin{aligned} \sigma = & \lim_{L \rightarrow \infty} \left(-\frac{1}{L} \ln \left[\exp(-Lm_0) \right] \right) \\ & + \lim_{L \rightarrow \infty} \left(-\frac{1}{L} \ln \left[\sqrt{\frac{2 \sinh(m_0)}{\pi}} \frac{1}{\sqrt{L}} + a_1 \frac{1}{L^{3/2}} + a_2 \frac{1}{L^{5/2}} + O\left(\frac{1}{L^{7/2}}\right) \right] \right) \\ & + \lim_{L \rightarrow \infty} \left(-\frac{1}{L} \ln \left[1 + O(\exp(-L\pi a)) + O(\exp(-2Lm_0)) \right] \right). \end{aligned}$$

Übereinstimmend mit einer früheren Beobachtung liefern die potenzartig von L abhängenden Vorfaktoren aus der zweiten Zeile im Limes $L \rightarrow \infty$ keinen

Beitrag; die dritte Zeile, bestehend aus Korrekturen vom endlichen Schlitz und weiteren Fourierkoeffizienten, ergibt ebenso Null.

Somit verbleibt die erste Zeile, die zu folgendem Ergebnis führt:

$$\sigma = m_0. \quad (5.35)$$

Die Grenzflächenspannung σ ist also die schon häufiger in dieser Arbeit verwendete temperaturabhängige Größe $m_0 = 2|\beta - \tilde{\beta}|$. Dieses Ergebnis ist in Übereinstimmung mit demjenigen Onsagers [9].

Die Einfachheit dieses exakten Ausdrucks stellt dabei eine Besonderheit des zweidimensionalen Ising-Modells dar: In höheren Dimensionen erhält man für die Grenzflächenspannung einen komplizierteren Ausdruck, der nach verschiedenen Ordnungen einer Kopplungskonstanten im Rahmen der ϕ^4 -Theorie entwickelt wird [10, 22].

5.3.8 Alternative: Rechnung ohne partielle Integration

Es wird der Frage nachgegangen, ob die in [25] genannte partielle Integration zwingend notwendig ist.

Zu berechnen ist der Fourierkoeffizient (5.17)

$$c_L = \operatorname{Re} \{I_2\} \quad (5.36)$$

$$\text{mit } I_2 = \int_{-1}^{+1} |\varepsilon(x)| \exp(iL\pi x) dx, \quad (5.37)$$

wobei zur weiteren Berechnung für $|\varepsilon(x)|$ der logarithmische Ausdruck (5.18)

$$|\varepsilon(x)| = \ln \left[\cosh(m_0) + 1 - \cos(\pi x) + \sqrt{[\cosh(m_0) + 1 - \cos(\pi x)]^2 - 1} \right]$$

verwendet wird. Aufgrund des Logarithmus reicht der Schlitz von $|\varepsilon(z)|$ mit $z \in \mathbb{C}$ in der oberen Halbebene von $i\frac{m_0}{\pi}$ bis $i\infty$ (siehe Anhang C); am bisher verwendeten Integrationsverfahren kann also prinzipiell festgehalten werden.

Durch Anwendung des bisherigen Parametrisierungsschemas in Anhang D (mit $|\varepsilon(x)|$ statt $h(x)$) folgt nach (5.23)-(5.25), wobei aufgrund des unendlichen Schlitzes nun ∞ als obere Integrationsgrenze auftaucht:

$$I_2 = \exp(-Lm_0) \cdot i \int_0^\infty \operatorname{dis}_\varepsilon^{(1)}(r) \cdot \exp(-L\pi r) dr \quad (5.38)$$

$$\text{mit } \operatorname{dis}_\varepsilon^{(1)}(r) = \lim_{\eta \rightarrow 0} \left\{ |\varepsilon(ir + i\frac{m_0}{\pi} + \eta)| - |\varepsilon(ir + i\frac{m_0}{\pi} - \eta)| \right\}. \quad (5.39)$$

Das untere Schlitzende wurde hierbei bereits durch Substitution auf Null gesetzt.

Zur Berechnung der einzelnen Limiten in (5.39) wird bereits die Näherung $r \ll 1$ im Rahmen der Sattelpunktsentwicklung verwendet; für den interessierenden Fall $L \gg 1$ lässt sich ja schon hier $\exp(-Lm_0)$ als dominierender

Term im Integranden (5.38) absehen, der nur für kleine r nennenswerte Beiträge liefert. Insbesondere wird der Logarithmus durch sein Argument angenähert werden; hierdurch wird das obere Schlitzende auf den Wert der vergangenen Abschnitte gekürzt, was nach (5.29) aber nur die unwesentliche Korrektur $[1 + O(\exp(-L\pi a))]$ hervorruft.

$$\begin{aligned} & \lim_{\eta \rightarrow 0} \left| \varepsilon \left(ir + i \frac{m_0}{\pi} \pm \eta \right) \right| \\ &= \lim_{\eta \rightarrow 0} \ln \left[1 + \cosh(m_0) - \cosh(\pi r + m_0 \mp i\pi\eta) + \right. \\ & \quad \left. + \sqrt{[\cosh(m_0) + 1 - \cosh(\pi r + m_0 \mp i\pi\eta)]^2 - 1} \right]; \end{aligned}$$

hier greift wegen $r \ll 1$ die Näherung $\ln(1 + x) = x + O(x^2)$ für $x \ll 1$:

$$\begin{aligned} &= \lim_{\eta \rightarrow 0} (\cosh(m_0) - \cosh(\pi r + m_0 \mp i\pi\eta)) \\ &+ \lim_{\eta \rightarrow 0} \sqrt{[\cosh(m_0) + 1 - \cosh(\pi r + m_0 \mp i\pi\eta)]^2 - 1} + \text{quadratische} \\ &\quad \text{Ordnung} \\ &\stackrel{(5.3.4)}{=} \cosh(m_0) - \cosh(\pi r + m_0) \\ &\quad \pm 2i \sqrt{\sinh(\frac{\pi r}{2})} \cdot \sqrt{\sinh(\frac{\pi r}{2} + m_0)[1 - \sinh(\frac{\pi r}{2} + m_0) \cdot \sinh(\frac{\pi r}{2})]} \\ &\quad + \text{quadratische} \\ &\quad \text{Ordnung}. \end{aligned}$$

Durch die Näherung des Logarithmus konnte die Rechnung somit auf die in Abschnitt 5.3.4 berechneten Limiten zurückgeführt werden. Die quadratische Ordnung bezieht sich dabei auf das Argument des Logarithmus.

Bei der Differenzbildung (5.39) hebt sich der Term $\cosh(m_0) - \cosh(\pi r + m_0)$, der von der Ordnung $O(r)$ ist, weg. Die verbleibenden Wurzelterme werden wie in 5.3.5 entwickelt:

$$\text{dis}_\varepsilon^{(1)}(r) = 2i \sqrt{2\pi \sinh(m_0)} \cdot \sqrt{r} + O(r^{3/2}). \quad (5.40)$$

Die Ordnung $O(r^{3/2})$ stammt dabei einerseits von der Taylorentwicklung der Wurzelausdrücke, andererseits von der quadratischen Ordnung des Logarithmus: Nur der gemischte Term aus der Quadratbildung hebt sich in der Differenz (5.39) nicht weg, und dessen niedrigste Ordnung lautet $O(r) \cdot O(\sqrt{r}) = O(r^{3/2})$. Da diese also offensichtlich komplizierter Natur ist, wird hier davon abgesehen, diese explizit anzugeben.

Mit $\text{dis}_\varepsilon^{(1)}(r)$ in der genäherten Form (5.40) enthält I_2 (5.38) bereits aus Anhang E bekannte Gammafunktionen, und für die Energieaufspaltung $\Delta E = -L c_L [1 + O(\exp(-2Lm_0))]$ folgt bis auf die exponentiellen Korrekturen

$$\Delta E = \exp(-Lm_0) \left[\sqrt{\frac{2 \sinh(m_0)}{\pi}} \cdot \frac{1}{\sqrt{L}} + O\left(\frac{1}{L^{3/2}}\right) \right] \quad (5.41)$$

in Übereinstimmung mit dem bisherigen Ergebnis (5.32) und [25].

Die Rechnung ohne partielle Integration führt also auch zum Ziel, allerdings ist das Ordnen nach Potenzen erheblich verwickelter; aus diesem Grund wird hier nur die niedrigste Ordnung angegeben.

5.3.9 Alternative: Wurzelnäherung für $|\varepsilon(x)|$

Ausgangspunkt ist erneut (5.36)-(5.39).

Zur Berechnung der Diskontinuität $\text{dis}_\varepsilon^{(1)}(r)$ (5.39) im Rahmen der Sattelpunktsentwicklung lässt sich ausgehend von (5.13) in der Nähe des kritischen Punktes $\beta \approx \beta_C$ und für kleines Argument eine einfache Formel für $|\varepsilon(x)|$ finden:

$$\begin{aligned} \cosh(|\varepsilon(x)|) &= \cosh(m_0) + 1 - \cos(\pi x) \\ \Leftrightarrow 2 \sinh^2\left(\frac{1}{2}|\varepsilon(x)|\right) &= 2 \sin^2\left(\frac{1}{2}\pi x\right) + \frac{1}{2}m_F^2 \\ \text{mit } m_0 &= 2|\beta - \tilde{\beta}|, \quad m_F = 2 \sinh(|\beta - \tilde{\beta}|). \end{aligned}$$

Aus $\beta \approx \beta_C \xrightarrow{(2.85)} \beta \approx \tilde{\beta}$ folgt $m_0 \ll 1$ und damit auch $m_F \ll 1$ sowie $m_0 \approx m_F$. Für kleine x kann der Sinusterm durch sein Argument angenähert werden; für $m_0 \ll 1$ und kleine x ist $|\varepsilon(x)|$ selber klein und der sinh-Term kann ebenfalls durch sein Argument angenähert werden.

Damit ergibt sich die Näherungsformel

$$|\varepsilon(x)| \approx \sqrt{m_0^2 + \pi^2 x^2}, \quad (5.42)$$

welche im Folgenden als Wurzelnäherung bezeichnet wird. Deren Gültigkeitsbereich wird in Abb. 5.6 verdeutlicht durch Vergleich mit dem ungenäherten $|\varepsilon(x)|$ aus Abb. 2.6.

Da aufgrund der Sattelpunktsentwicklung $r \ll 1$ ist und in der Nähe des kritischen Punktes $m_0 \ll 1$ gilt (sowie die Annahme eines kleinen η mit dem Integrationsweg und der Limesbildung $\eta \rightarrow 0$ verträglich ist), ist das Argument von $|\varepsilon(ir + i\frac{m_0}{\pi} \pm \eta)|$ in $\text{dis}_\varepsilon^{(1)}(r)$ (5.39) klein und die Wurzelnäherung kann zur Berechnung der Diskontinuität verwendet werden.

Eine Diskontinuität tritt dabei weiterhin auf wegen der komplexen Wurzel: Die Verzweigungspunkte von $\sqrt{m_0^2 + \pi^2 z^2}$ mit $z \in \mathbb{C}$ liegen bei $z_1 = +i\frac{m_0}{\pi}$ und $z_2 = -i\frac{m_0}{\pi}$ (vgl. Anhang C); der unendliche Schlitz wird wie in Abb. 5.7 gelegt. Die prinzipielle Vorgehensweise bezüglich der Schlitzintegration aus den vorangegangenen Abschnitten kann also beibehalten werden. Lediglich die exponentielle Korrektur (5.29) aufgrund eines endlichen Schlitzes entfällt.

Mit der Methode aus 5.3.4 berechnet sich die Diskontinuität zu

$$\text{dis}_\varepsilon^{(1)}(r) = 2i\sqrt{\pi^2 r^2 + 2rm_0\pi}. \quad (5.43)$$

Das Einsetzen in das Integral I_2 (5.38) führt auf die MacDonald-Funktion $K_1(Lm_0)$ [58]:

$$I_2 = -2 \frac{m_0}{L\pi} K_1(Lm_0).$$

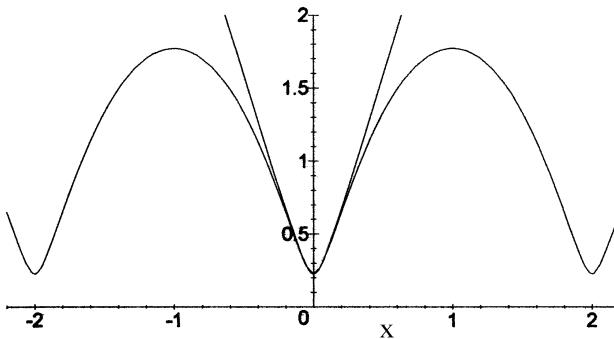


Abbildung 5.6: Vergleich der Wurzelnäherung mit dem ungenäherten Ausdruck für $|\varepsilon(x)|$ bei festem $\beta = 0,5$

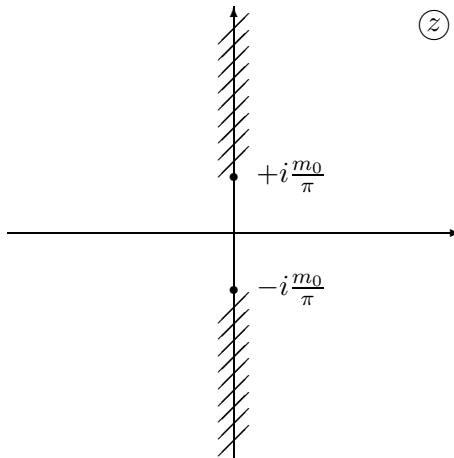


Abbildung 5.7: Schlitzstruktur der Wurzelnäherung

Aus deren asymptotischen ($L \gg 1$) Form [59] (Kap. 9.1, Gl. (9.56d), S. 466) bzw. [58] (Teil II, 8.451 Nr. 6, S. 360)

$$K_1(L m_0) = \exp(-L m_0) \left[\sqrt{\frac{\pi}{2m_0}} \frac{1}{\sqrt{L}} + O\left(\frac{1}{L^{3/2}}\right) \right]$$

folgt mit $c_L = \operatorname{Re}\{I_2\}$ (5.36) für die Energieaufspaltung $\Delta E = -L c_L [1 + O(\exp(-2 L m_0))]$ (5.27) bis auf die exponentielle Korrektur:

$$\Delta E = \exp(-L m_0) \left[\sqrt{\frac{2m_0}{\pi}} \cdot \frac{1}{\sqrt{L}} + O\left(\frac{1}{L^{3/2}}\right) \right]. \quad (5.44)$$

Um zu höheren Ordnungen $O(\frac{1}{L^{n/2}})$ zu gelangen, wird (5.43) nach Taylor entwickelt, was, in I_2 (5.38) eingesetzt, erneut in Gammafunktionen (Anhang E) resultiert; das Ergebnis für die Energieaufspaltung lautet dann:

$$\begin{aligned} \Delta E = & \exp(-L m_0) \left[\sqrt{\frac{2m_0}{\pi}} \cdot \frac{1}{\sqrt{L}} + \frac{3}{4\sqrt{2\pi m_0}} \cdot \frac{1}{L^{3/2}} \right. \\ & \left. - \frac{15}{64\sqrt{2\pi} m_0^{3/2}} \cdot \frac{1}{L^{5/2}} + \frac{105}{512\sqrt{2\pi} m_0^{5/2}} \cdot \frac{1}{L^{7/2}} + O\left(\frac{1}{L^{9/2}}\right) \right]. \end{aligned} \quad (5.45)$$

Eine Rechnung mit partieller Integration von (5.38) mit der zuvor eingesetzten Wurzelnäherung führt übrigens auf dasselbe Ergebnis.

Der Vorteil der Wurzelnäherung (5.42) liegt also offensichtlich in dem komfortableren Erhalt höherer Ordnungen. Der Nachteil indes besteht in der Einschränkung $\beta \approx \beta_C$.

Der Fall $\beta \approx \beta_C$ soll nachvollzogen werden mit dem Ergebnis (5.32)-(5.34), das man aus dem ungenähererten $|\varepsilon(x)|$ (5.13) erhielt (unter Vernachlässigung der exponentiellen Korrekturen).

Da für $\beta \approx \beta_C$ $m_0 \ll 1$ gilt, werden hierzu die m_0 enthaltenden hyperbolischen Funktionen in (5.32)-(5.34) nach Taylor entwickelt, und zwar ähnlich der Methode aus 5.3.5. Um das Ergebnis aus der Wurzelnäherung zu reproduzieren, wird es dabei ausreichen, innerhalb derselben L -Ordnung lediglich die für $m_0 \ll 1$ dominierende m_0 -Ordnung mitzunehmen.

So erhält man in der Ordnung $O(\frac{1}{\sqrt{L}})$:

$$\sqrt{\sinh(m_0)} \stackrel{m_0 \ll 1}{=} \sqrt{m_0} + O(m_0^{5/2}).$$

Innerhalb der Ordnung $O(\frac{1}{L^{3/2}})$ dominiert im Koeffizienten a_1 (5.33) der Ausdruck

$$\frac{\cosh(m_0)}{\sqrt{\sinh(m_0)}} \stackrel{m_0 \ll 1}{=} \frac{1}{\sqrt{m_0}} + O(m_0^{3/2})$$

gegenüber $\sinh^{3/2}(m_0)$, der bereits von der Ordnung $O(m_0^{3/2})$ ist.

Für die Ordnung $O(\frac{1}{L^{5/2}})$ (Koeffizient a_2 (5.34)) lautet der führende Term

$$\frac{\cosh^2(m_0)}{\sinh^{3/2}(m_0)} \stackrel{m_0 \ll 1}{=} \frac{1}{m_0^{3/2}} + O(\sqrt{m_0}),$$

während die anderen Terme mindestens von der Ordnung $O(\sqrt{m_0})$ bzw. $O(m_0^{5/2})$ sind.

Damit lautet das Ergebnis für die Energieaufspaltung (5.32)-(5.34) in der Näherung $\beta \approx \beta_C$ unter Mitnahme der am stärksten dominierenden Terme in m_0 :

$$\Delta E \stackrel{m_0 \ll 1}{\approx} \exp(-L m_0) \left[\sqrt{\frac{2 m_0}{\pi}} \cdot \frac{1}{\sqrt{L}} + \frac{3}{4\sqrt{2\pi m_0}} \cdot \frac{1}{L^{3/2}} - \frac{15}{64\sqrt{2\pi} m_0^{3/2}} \cdot \frac{1}{L^{5/2}} + O\left(\frac{1}{L^{7/2}}\right) \right]. \quad (5.46)$$

Dies ist in Übereinstimmung mit (5.45).

Das Ergebnis (5.45) aus der Wurzelnäherung, das im Bereich $\beta \approx \beta_C$ gilt, lässt sich also überzeugend bis inklusive der Ordnung $O(\frac{1}{L^{5/2}})$ aus dem bisherigen, allgemeineren Ergebnis (5.32)-(5.34) reproduzieren.

Innerhalb der Wurzelnäherung konnte dabei die Ordnung $O(\frac{1}{L^{7/2}})$ noch explizit angegeben werden.

Insofern stellt die Wurzelnäherung (5.42) eine brauchbare Approximation dar; insbesondere aufgrund ihres einfacheren analytischen Verhaltens erlaubt sie besseren Einblick in die Rechnungen und hat sich als ein geeignetes Instrument zur Ergebnisüberprüfung herausgestellt.

Kapitel 6

Alternativer Zugang zur Energieaufspaltung

In diesem Kapitel wird eine alternative Berechnungsmethode der Energieaufspaltung vorgeführt, die auf anderen Grundüberlegungen basiert und dadurch neue Einsichten eröffnet. Hierzu findet das in 4.1.6 eingeführte Konzept der Fermionanregungen Anwendung. Mit dessen Hilfe wird der Zusammenhang zwischen Ein-Fermion-Anregungen und einer Grenzfläche senkrecht zur x -Richtung aufgedeckt, welcher sich bereits bei der Jordan-Wigner-Transformation andeutete. Aus diesen Überlegungen ergibt sich unter Vernachlässigung exponentieller Korrekturen für $L, T \gg 1$ die Energieaufspaltung als Integral über Ein-Fermion-Energien, welches im Rahmen einer Sattelpunktsintegration berechnet wird. Die in Kapitel 5 erhaltenen Ergebnisse werden hierdurch untermauert. Insbesondere kann ein expliziter Zusammenhang gefunden werden zwischen dem hier berechneten Integral über Ein-Fermion-Energien und demjenigen ($\Delta E = -L c_L$) in Kapitel 5, das sich aus den niedrigsten Fourierkoeffizienten c_L ergab.

6.1 Die Idee

Die neue Idee basiert auf einer Beobachtung, die bei der Jordan-Wigner-Transformation (4.18), (4.19) gemacht wurde: Die Erzeugung eines Fermions am Gitterplatz m bewirkt nach (4.28)

$$C_m^\dagger = U_{m-1} \sigma_m^+$$

offenbar eine Umkehr der ersten $m-1$ Spins in einer Zeile:

$$U_{m-1} |s_1, \dots, s_L\rangle = |-s_1, \dots, -s_{m-1}, s_m, \dots, s_L\rangle.$$

Waren die Spins vor der Anwendung von U_{m-1} parallel zueinander ausgerichtet, tritt danach ein Kink der Spins an der Stelle m (genauer ausgedrückt: von $m-1$ zu m) auf, wie in Abb. 6.1 verdeutlicht wird. Dieser Kink trennt nun zwei Domänen unterschiedlicher Spinausrichtung und repräsentiert somit eine Grenzfläche, wie sie in Abb. 6.2 gezeigt ist.

Erzeugung eines Fermions bei $m \iff$ Kink der Spins von $m-1$ zu m

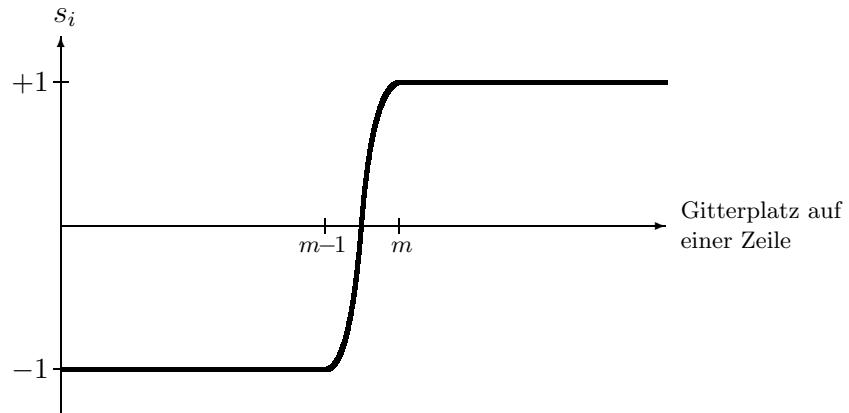


Abbildung 6.1: Kink der Spins von $m-1$ zu m

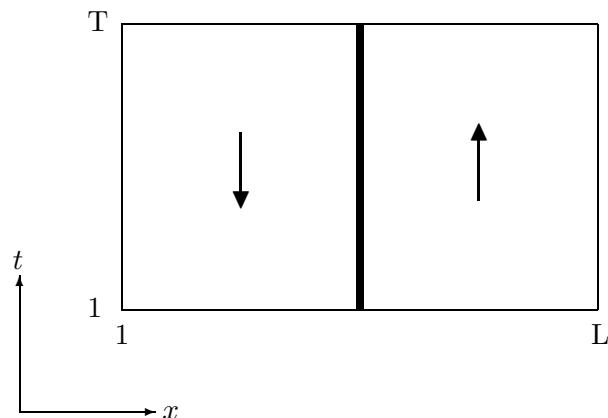


Abbildung 6.2: Grenzfläche senkrecht zur x -Richtung

Der sich dadurch abzeichnende Zusammenhang

Fermionerzeugung \iff Grenzfläche senkrecht zur x -Richtung

soll daher Ausgangspunkt für eine Charakterisierung der entsprechenden Zustandssummen $Z_{\tau_x,+}$ mit $(\tau_x = -1)$ und ohne $(\tau_x = +1)$ derartige Grenzfläche

sein. Hierzu bietet sich eine Beschreibung mithilfe des Konzepts der Fermionanregungen an, welches in 4.1.6 eingeführt wurde. Aus den dort erfolgten Überlegungen läßt sich schon der gewünschte Trend absehen:

Für periodische RB $\tau_x = +1$,

$$Z'_{++} = \text{Sp}_{\mathcal{H}_+} \left[(V^+)^T \right] + \text{Sp}_{\mathcal{H}_-} \left[(V^-)^T \right],$$

sind lediglich *geradzahlige Anregungen* aus den Grundzuständen zu H^+ und H^- erlaubt (n gerade), wie in 4.1.6 bereits ausführlich diskutiert wurde.

Bei antiperiodischen RB $\tau_x = -1$,

$$Z'_{-+} = \text{Sp}_{\mathcal{H}_+} \left[(V^-)^T \right] + \text{Sp}_{\mathcal{H}_-} \left[(V^+)^T \right],$$

ist dies anders. Man beachte hierzu die entsprechenden Aussagen (4.70)-(4.72) in 4.1.6: Bei V^-/H^- bewirkt die Restriktion \mathcal{H}_+ auf eine gerade Fermion-Gesamtzahl nämlich *ungerade Fermionanregungen*, da ein Fermion im Grundzustand von H^- vorliegt (aus N gerade folgt n ungerade). Für V^+/H^+ hingegen bedeutet die Restriktion \mathcal{H}_- auf eine ungerade Fermion-Gesamtzahl *ungerade Fermionanregungen*, da im entsprechenden Grundzustand kein Teilchen vorhanden ist (sowohl N als auch n sind ungerade).

Antiperiodische RB rufen also ungerade ($n = 1, 3, 5, \dots$) Fermionanregungen hervor, während die Zustandssumme bei periodischen RB nur gerade ($n = 0, 2, 4, \dots$) enthält:

$$\begin{aligned} \tau_x = +1 &\iff \text{geradzahlige Fermionanregungen;} \\ \tau_x = -1 &\iff \text{ungeradzahlige Fermionanregungen}. \end{aligned}$$

Nach den bisherigen Diskussionen von Zustandssummen-Beiträgen steht zu erwarten, daß diese von den niedrigsten Anregungen (0 und 1) dominiert werden (wie später noch explizit gezeigt wird). Eine Grenzfläche senkrecht zur x -Richtung scheint sich also durch ein angeregtes Fermion gegenüber einer nicht vorhandenen auszuzeichnen.

$$\text{angeregtes Fermion} \iff \text{Grenzfläche senkrecht zur } x\text{-Richtung}.$$

Durch diese Beobachtungen wird das weitere Vorgehen inspiriert, bei dem sich die geäußerten Zusammenhänge explizit wiederfinden werden.

6.2 Charakterisierung über Fermion-Anregungen

Im vorangehenden Abschnitt wurde die Idee nahegebracht, Zustandssummen über ihre Fermionanregungen zu charakterisieren. Dies wird in diesem Unterkapitel formal umgesetzt. Nach einer Erläuterung der verwendeten Notation werden zunächst die Grundgrößen Y_α^δ , danach die daraus ableitbaren fermionischen Zustandssummen $Z_{\epsilon_x \epsilon_t}^F$, und schließlich die Spin-Zustandssummen $Z_{\tau_x \tau_t}$ entsprechend umformuliert.

6.2.1 Notation

Die im Folgenden angewandte Notation basiert im Wesentlichen auf den Grundüberlegungen aus Kapitel 4.1.6.

Hierzu sei noch einmal ausdrücklich betont, daß der fortan zentrale Begriff der *Fermion-Anregung* stets auf die Grundzustände von H^+ und H^- bezogen ist (im Gegensatz zur Gesamt-Fermionzahl, siehe (4.70)-(4.72)); soweit nicht anders erwähnt werde stets die Tieftemperaturphase $\beta > \beta_C$ betrachtet.

$$H^{-\delta} \Rightarrow \begin{cases} \delta = +1 : H^- \rightarrow \text{gerade Impulse } k = 0, 2, 4, \dots, 2L - 2; \\ \delta = -1 : H^+ \rightarrow \text{ungerade Impulse } k = 1, 3, 5, \dots, 2L - 1. \end{cases}$$

Grundzustände

$|0+\rangle$: Grundzustand von H^+ ,
Vakuumzustand, in dem kein Teilchen vorliegt;

$$H |0+\rangle = E_{0+} |0+\rangle; \quad E_{0+} = -\frac{1}{2} (+\varepsilon_1 + \varepsilon_3 + \dots + \varepsilon_{2L-1}).$$

$|0-\rangle$: Grundzustand von H^- ,
Zustand mit aufgefülltem „Dirac-See“, d.h. mit
anwesendem ε_0 -Teilchen negativer Energie ($\beta > \beta_C$);

$$H |0-\rangle = E_{0-} |0-\rangle; \quad E_{0-} = -\frac{1}{2} (+|\varepsilon_0| + \varepsilon_2 + \dots + \varepsilon_{2L-2}).$$

Um beide Grundzustände gleichzeitig ansprechen zu können, wird noch der Vakuumzustand $|\Omega\rangle$ eingeführt:

$$|\Omega\rangle = |0+\rangle + |0-\rangle. \quad (6.1)$$

(Zugunsten einer später übersichtlicheren Zustandssumme wird auf eine Normierung verzichtet.)

Durch Anwendung der Erzeugungsoperatoren ξ_k^\dagger auf $|0+\rangle$ und $|0-\rangle$ erhält man die Fermion-Anregungen, die höhere Energiezustände darstellen. Die Energienbezeichnung $E_{n\pm; k_1, \dots, k_n}$ aus 2.2.10 ist bereits an die Schreibweise angepaßt:

1-Fermion-Anregungen

$$\text{zu } H^+ \text{ gehörend: } |1+; k\rangle = \xi_k^\dagger |0+\rangle, \quad k \text{ ungerade: } k = 1, 3, 5, \dots, 2L - 1; \\ H |1+; k\rangle = E_{1+;k} |1+; k\rangle; \quad E_{1+;k} = E_{0+} + \varepsilon_k.$$

$$\text{zu } H^- \text{ gehörend: } |1-; k\rangle = \xi_k^\dagger |0-\rangle, \quad k \text{ gerade: } k = 0, 2, 4, \dots, 2L - 2; \\ H |1-; k\rangle = E_{1-;k} |1-; k\rangle; \quad E_{1-;k} = E_{0-} + |\varepsilon_k|.$$

Um die Zustände für gerade und ungerade k zusammenzufassen, wird desweiteren definiert:

$$|1; k\rangle = \begin{cases} |1+; k\rangle & \text{für } k \text{ ungerade;} \\ |1-; k\rangle & \text{für } k \text{ gerade;} \end{cases} \quad k = 0, 1, 2, 3, \dots, 2L - 1. \quad (6.2)$$

2-Fermion-Anregungen

$$|2+; k, l\rangle = \xi_k^\dagger \xi_l^\dagger |0+\rangle, \quad k \neq l \text{ ungerade;} \\ H |2+; k, l\rangle = E_{2+;k,l} |2+; k, l\rangle; \quad E_{2+;k,l} = E_{0+} + \varepsilon_k + \varepsilon_l.$$

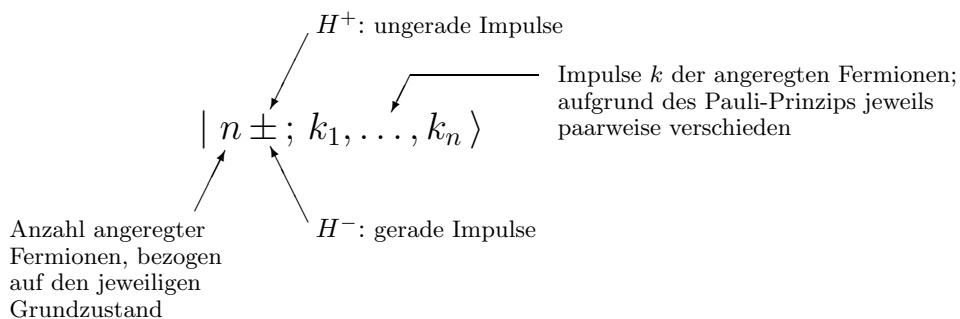
$$|2-; k, l\rangle = \xi_k^\dagger \xi_l^\dagger |0-\rangle, \quad k \neq l \text{ gerade;} \\ H |2-; k, l\rangle = E_{2-;k,l} |2-; k, l\rangle; \quad E_{2-;k,l} = E_{0-} + |\varepsilon_k| + |\varepsilon_l|.$$

3-Fermion-Anregungen

$$|3\pm; k, l, m\rangle = \xi_k^\dagger \xi_l^\dagger \xi_m^\dagger |0\pm\rangle, \quad k \neq l \neq m \neq k \begin{matrix} \text{ungerade} \\ \text{gerade} \end{matrix};$$

usw.

$$H |n\pm; k_1, \dots, k_n\rangle = E_{n\pm; k_1, \dots, k_n} |n\pm; k_1, \dots, k_n\rangle.$$



Somit können die bei der Spurbildung über $V^T = \exp[-HT]$ auftretenden Eigenwerte $\exp[-E_{n\pm;k_1,\dots,k_n} \cdot T]$ durch die folgenden Diagonalelemente dargestellt werden; auf diese Weise überblickt man direkt die Art der beteiligten Fermion-Anregungen.

Grundzustands-Beiträge

$$\exp[-E_{0+} \cdot T] = \langle 0+ | e^{-HT} | 0+ \rangle; \quad \exp[-E_{0-} \cdot T] = \langle 0- | e^{-HT} | 0- \rangle;$$

1-Fermion-Beiträge

$$\begin{aligned} \exp[-E_{1+;k} \cdot T] &= \langle 1+; k | e^{-HT} | 1+; k \rangle \quad \text{mit } k \text{ ungerade;} \\ \exp[-E_{1-;k} \cdot T] &= \langle 1-; k | e^{-HT} | 1-; k \rangle \quad \text{mit } k \text{ gerade;} \end{aligned}$$

usw.

n-Fermion-Beiträge

$$\exp[-E_{n\pm;k_1,\dots,k_n} \cdot T] = \langle n\pm; k_1, \dots, k_n | e^{-HT} | n\pm; k_1, \dots, k_n \rangle.$$

6.2.2 Die Grundgrößen Y_α^δ

Da sich sowohl die Fermion- als auch die Spin-Zustandssummen kompakt über die Y_α^δ darstellen lassen, erfolgt zunächst deren Charakterisierung. Die Zustandssummen können anschließend aus diesen zusammengesetzt werden.

Zur Erinnerung:

$$Y_\alpha^\delta \stackrel{(3.20)}{=} \sum_j \exp[-\mathcal{E}_{\alpha,j}^\delta \cdot T] \stackrel{(4.58)}{=} \text{Sp}_{\mathcal{H}_\alpha} \left[(V^{-\delta})^T \right]$$

δ = +1 : k gerade; aus H^-/V^- stammend
 δ = -1 : k ungerade; aus H^+/V^+ stammend

α = +1 : gerade Anzahl an MZ; gerade Fermion-Gesamtzahl
 α = -1 : ungerade Anzahl an MZ; ungerade Fermion-Gesamtzahl

Die nachfolgenden Ergebnisse lassen sich direkt aus den Aussagen (4.70)-(4.72) ableiten; zum besseren Nachverfolgen werden kleine Zwischenschritte eingeschüttet.

$$\boxed{\mathbf{Y}_+^+} \quad Y_+^+ = \sum_j \exp \left[-\mathcal{E}_{+,j}^+ \cdot T \right]$$

Die Größe \mathcal{E}_+^+ wird vergleichbar zur Grundzustandsenergie E_{0-} ausgedrückt:

$$\begin{aligned} \mathcal{E}_+^+ &= -\frac{1}{2} \sum_k \begin{cases} (\pm \varepsilon_k) & \text{gerade Anzahl an MZ} \\ \text{gerade} & \end{cases} \\ &= -\frac{1}{2} (\pm \varepsilon_0 \pm \varepsilon_2 \pm \dots \pm \varepsilon_{2L-2}) & \text{gerade Anzahl an MZ} \\ &= -\frac{1}{2} (\pm |\varepsilon_0| \pm \varepsilon_2 \pm \dots \pm \varepsilon_{2L-2}) & \text{ungerade Anzahl an MZ.} \end{aligned}$$

Damit ergeben sich auf $E_{0-} = -\frac{1}{2} (+|\varepsilon_0| + \varepsilon_2 + \dots + \varepsilon_{2L-2})$ bezogen folgende Beiträge zu \mathcal{E}_+^+ :

$$\begin{aligned} E_{1-;k} &= E_{0-} + |\varepsilon_k| & k \text{ gerade} & \quad 1\text{-Fermion-Anr.} \\ E_{3-;k,l,m} &= E_{0-} + |\varepsilon_k| + |\varepsilon_l| + |\varepsilon_m| & k \neq l \neq m \neq k \text{ gerade} & \quad 3\text{-Fermion-Anr.} \\ E_{5-;k,l,m,n,p} & & & \quad 5\text{-Fermion-Anr.} \\ &&&\text{usw.} \end{aligned}$$

In \mathcal{E}_+^+ respektive Y_+^+ sind also nur **ungerade Fermion-Anregungen bei geraden Impulsen** enthalten:

$$\begin{aligned} Y_+^+ &= \sum_k \begin{cases} \exp[-E_{1-;k} \cdot T] & \text{gerade} \\ & \end{cases} + \sum_{\substack{k,l,m \\ k \neq l \neq m \neq k \\ \text{gerade}}} \exp[-E_{3-;k,l,m} \cdot T] + 5\text{-F-Anr.} + \dots \\ &= \sum_k \langle 1-; k | e^{-HT} | 1-; k \rangle + \sum_{\substack{k,l,m \\ k \neq l \neq m \neq k \\ \text{gerade}}} \langle 3-; k, l, m | e^{-HT} | 3-; k, l, m \rangle \\ &\quad + 5\text{-F-Anr.} + \dots \end{aligned}$$

$$\boxed{\mathbf{Y}_-^+} \quad Y_-^+ = \sum_j \exp \left[-\mathcal{E}_{-,j}^+ \cdot T \right]$$

$$\begin{aligned} \mathcal{E}_-^+ &= -\frac{1}{2} \sum_k \begin{cases} (\pm \varepsilon_k) & \text{ungerade Anzahl an MZ} \\ \text{gerade} & \end{cases} \\ &= -\frac{1}{2} (\pm \varepsilon_0 \pm \varepsilon_2 \pm \dots \pm \varepsilon_{2L-2}) & \text{ungerade Anzahl an MZ} \\ &= -\frac{1}{2} (\pm |\varepsilon_0| \pm \varepsilon_2 \pm \dots \pm \varepsilon_{2L-2}) & \text{gerade Anzahl an MZ.} \end{aligned}$$

Beiträge zu \mathcal{E}_+^+ :

$$\begin{aligned}
 E_{0-} & \quad \text{Grundzustand} \hat{=} 0\text{-Fermion-Anr.} \\
 E_{2-;k,l} = E_{0-} + |\varepsilon_k| + |\varepsilon_l| & \quad k \neq l \text{ gerade} \quad 2\text{-Fermion-Anr.} \\
 E_{4-;k,l,m,n} & \quad 4\text{-Fermion-Anr.} \\
 & \quad \text{usw.}
 \end{aligned}$$

Die Beiträge zu \mathcal{E}_+^-/Y_+^- bestehen somit aus **geraden Fermion-Anregungen bei geraden Impulsen**:

$$\begin{aligned}
 Y_+^+ &= \exp[-E_{0-} \cdot T] + \sum_{\substack{k,l \\ k \neq l \\ \text{gerade}}} \exp[-E_{2-;k,l} \cdot T] + 4\text{-F-Anr.} + \dots \\
 &= \langle 0- | e^{-HT} | 0- \rangle + \sum_{\substack{k,l \\ k \neq l \\ \text{gerade}}} \langle 2-; k, l | e^{-HT} | 2-; k, l \rangle + 4\text{-F-Anr.} + \dots
 \end{aligned}$$

\mathbf{Y}_+^-

$$Y_+^- = \sum_j \exp[-\mathcal{E}_{+,j}^- \cdot T]$$

Hier ist keine Verschiebung der Minuszeichen notwendig.

$$\begin{aligned}
 \mathcal{E}_+^- &= -\frac{1}{2} \sum_k (\pm \varepsilon_k) \quad \text{gerade Anzahl an MZ} \\
 &= -\frac{1}{2} (\pm \varepsilon_1 \pm \varepsilon_3 \pm \dots \pm \varepsilon_{2L-1}) \quad \text{gerade Anzahl an MZ.}
 \end{aligned}$$

Auf den Grundzustand $E_{0+} = -\frac{1}{2}(+\varepsilon_1 + \varepsilon_3 + \dots + \varepsilon_{2L-1})$ bezogen ergeben sich somit folgende Beiträge zu \mathcal{E}_+^- :

$$\begin{aligned}
 E_{0+} & \quad \text{Grundzustand} \hat{=} 0\text{-Fermion-Anr.} \\
 E_{2+;k,l} = E_{0+} + \varepsilon_k + \varepsilon_l & \quad k \neq l \text{ ungerade} \quad 2\text{-Fermion-Anr.} \\
 E_{4+;k,l,m,n} & \quad 4\text{-Fermion-Anr.} \\
 & \quad \text{usw.}
 \end{aligned}$$

In \mathcal{E}_+^-/Y_+^- sind demnach **gerade Fermion-Anregungen mit ungeraden Impulsen** vertreten:

$$\begin{aligned}
 Y_+^- &= \exp[-E_{0+} \cdot T] + \sum_{\substack{k,l \\ k \neq l \\ \text{ungerade}}} \exp[-E_{2+;k,l} \cdot T] + 4\text{-F-Anr.} + \dots \\
 &= \langle 0+ | e^{-HT} | 0+ \rangle + \sum_{\substack{k,l \\ k \neq l \\ \text{ungerade}}} \langle 2+; k, l | e^{-HT} | 2+; k, l \rangle + 4\text{-F-Anr.} + \dots
 \end{aligned}$$

$$\boxed{Y_-^-} \quad Y_-^- = \sum_j \exp \left[-\mathcal{E}_{-,j}^- \cdot T \right]$$

$$\begin{aligned} \mathcal{E}_-^- &= -\frac{1}{2} \sum_{\substack{k \\ \text{ungerade}}} (\pm \varepsilon_k) && \text{ungerade Anzahl an MZ} \\ &= -\frac{1}{2} (\pm \varepsilon_1 \pm \varepsilon_3 \pm \dots \pm \varepsilon_{2L-1}) && \text{ungerade Anzahl an MZ} \end{aligned}$$

Beiträge zu \mathcal{E}_-^- :

$$\begin{aligned} E_{1+;k} &= E_{0+} + \varepsilon_k & k \text{ ungerade} & 1\text{-Fermion-Anr.} \\ E_{3+;k,l,m} &= E_{0+} + \varepsilon_k + \varepsilon_l + \varepsilon_m & k \neq l \neq m \neq k \text{ ungerade} & 3\text{-Fermion-Anr.} \\ E_{5+;k,l,m,n,p} & & & 5\text{-Fermion-Anr.} \\ & & \text{usw.} & \end{aligned}$$

\mathcal{E}_-^- respektive Y_-^- besteht damit aus **ungeraden Fermion-Anregungen bei ungeraden Impulsen**:

$$\begin{aligned} Y_-^- &= \sum_{\substack{k \\ \text{ungerade}}} \exp [-E_{1+;k} \cdot T] + \sum_{\substack{k,l,m \\ \text{ungerade}}} \exp [-E_{3+;k,l,m} \cdot T] + 5\text{-F-Anr.} + \dots \\ &= \sum_{\substack{k \\ \text{ungerade}}} \langle 1+; k | e^{-HT} | 1+; k \rangle + \sum_{\substack{k,l,m \\ \text{ungerade}}} \langle 3+; k, l, m | e^{-HT} | 3+; k, l, m \rangle \\ &\quad + 5\text{-F-Anr.} + \dots \end{aligned}$$

Damit ist die Aufstellung der Y_α^δ komplett. Zur Überprüfung der Ergebnisse in Kurzform sei an die Aussagen (4.70)-(4.72) erinnert.

6.2.3 Fermionische Zustandssummen $Z_{\epsilon_x \epsilon_t}^F$

Aus den entsprechend formulierten Y_α^δ des vorangehenden Abschnitts lassen sich die fermionischen Sektor-Zustandssummen $Z_{\epsilon_x \epsilon_t}^F$ zusammensetzen:

$$\boxed{Z_{++}^F} \quad Z_{++}^F = Y_+^+ - Y_-^+$$

$$\begin{aligned} Z_{++}^F &= \sum_{\substack{k \\ \text{gerade}}} \exp[-E_{1-;k} \cdot T] + \sum_{\substack{k,l,m \\ k \neq l \neq m \neq k \\ \text{gerade}}} \exp[-E_{3-;k,l,m} \cdot T] + 5\text{-F-Anr.} + \dots \\ &\quad - \exp[-E_{0-} \cdot T] - \sum_{\substack{k,l \\ k \neq l \\ \text{gerade}}} \exp[-E_{2-;k,l} \cdot T] - 4\text{-F-Anr.} - \dots \\ &= - \langle 0- | e^{-HT} | 0- \rangle + \sum_{\substack{k \\ \text{gerade}}} \langle 1-;k | e^{-HT} | 1-;k \rangle \\ &\quad - \sum_{\substack{k,l \\ k \neq l \\ \text{gerade}}} \langle 2-;k,l | e^{-HT} | 2-;k,l \rangle + \sum_{\substack{k,l,m \\ k \neq l \neq m \neq k \\ \text{gerade}}} \langle 3-;k,l,m | e^{-HT} | 3-;k,l,m \rangle \\ &\quad - 4\text{-F-Anr.} + 5\text{-F-Anr.} - \dots + \dots \end{aligned}$$

Z_{++}^F enthält offensichtlich das gesamte Anregungsspektrum für gerade Impulse. Geradzahlige und ungeradzahlige Anregungen sind jedoch mit anderen Vorzeichen gewichtet. Da die niedrigeren Anregungsbeiträge dominanter sind, zeigt sich auch hier das negative Vorzeichen von Z_{++}^F (für $\beta > \beta_C$, siehe (4.86)).

$$\boxed{Z_{+-}^F} \quad Z_{+-}^F = Y_+^+ + Y_-^+$$

$$\begin{aligned} Z_{+-}^F &= \sum_{\substack{k \\ \text{gerade}}} \exp[-E_{1-;k} \cdot T] + \sum_{\substack{k,l,m \\ k \neq l \neq m \neq k \\ \text{gerade}}} \exp[-E_{3-;k,l,m} \cdot T] + 5\text{-F-Anr.} + \dots \\ &\quad + \exp[-E_{0-} \cdot T] + \sum_{\substack{k,l \\ k \neq l \\ \text{gerade}}} \exp[-E_{2-;k,l} \cdot T] + 4\text{-F-Anr.} + \dots \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 &= \langle 0- | e^{-HT} | 0- \rangle + \sum_{\substack{k \\ \text{gerade}}} \langle 1-; k | e^{-HT} | 1-; k \rangle \\
 &+ \sum_{\substack{k, l \\ k \neq l \\ \text{gerade}}} \langle 2-; k, l | e^{-HT} | 2-; k, l \rangle + \sum_{\substack{k, l, m \\ k \neq l \neq m \neq k \\ \text{gerade}}} \langle 3-; k, l, m | e^{-HT} | 3-; k, l, m \rangle \\
 &+ 4\text{-F-Anr.} + 5\text{-F-Anr.} + \dots
 \end{aligned}$$

Z_{+-}^F summiert über das komplette Anregungsspektrum gerader Impulse.

$$\boxed{Z_{-+}^F} \quad Z_{-+}^F = Y_+^- - Y_-^-$$

$$\begin{aligned}
 Z_{-+}^F &= \exp[-E_{0+} \cdot T] + \sum_{\substack{k, l \\ k \neq l \\ \text{ungerade}}} \exp[-E_{2+; k, l} \cdot T] + 4\text{-F-Anr.} + \dots \\
 &- \sum_{\substack{k \\ \text{ungerade}}} \exp[-E_{1+; k} \cdot T] - \sum_{\substack{k, l, m \\ k \neq l \neq m \neq k \\ \text{ungerade}}} \exp[-E_{3+; k, l, m} \cdot T] - 5\text{-F-Anr.} - \dots \\
 &= \langle 0+ | e^{-HT} | 0+ \rangle - \sum_{\substack{k \\ \text{ungerade}}} \langle 1+; k | e^{-HT} | 1+; k \rangle \\
 &+ \sum_{\substack{k, l \\ k \neq l \\ \text{ungerade}}} \langle 2+; k, l | e^{-HT} | 2+; k, l \rangle - \sum_{\substack{k, l, m \\ k \neq l \neq m \neq k \\ \text{ungerade}}} \langle 3+; k, l, m | e^{-HT} | 3+; k, l, m \rangle \\
 &+ 4\text{-F-Anr.} - 5\text{-F-Anr.} + \dots - \dots
 \end{aligned}$$

In Z_{-+}^F tritt das gesamte Anregungsspektrum für ungerade Impulse auf, erneut mit verschiedenen Vorzeichen gewichtet, die sich allerdings von denen bei Z_{++}^F unterscheiden. In diesem Fall ist die Zustandssumme positiv (vgl. (4.88)). Der Unterschied zu Z_{++}^F liegt hier (ungerade Impulse) im anders gearteten Grundzustand, in dem kein Teilchen vorhanden ist. Dementsprechend treten anders bezogene Anregungen sowie, da Z_{ex+}^F durch Subtraktion (4.77) hervorgeht, eine andere Vorzeichenverteilung auf.

Wäre in Z_{++}^F hingegen $\varepsilon_0 > 0$ ($\beta < \beta_C$), läge kein aufzufüllender Dirac-See und damit auch kein Teilchen im Grundzustand vor: Die Anregungen und deren Vorzeichengewichtung wären (bei geraden Impulsen) wie bei Z_{-+}^F . Dies deckt sich mit dem früher gefundenen Zusammenhang, daß für $\varepsilon_0 \lesssim 0$ ($\beta \gtrsim \beta_C$) $Z_{++}^F \lesssim 0$ gilt (siehe (4.86)).

$$Z_{--}^F$$

$$Z_{--}^F = Y_+^- + Y_-^-$$

$$\begin{aligned}
 Z_{--}^F &= \exp[-E_{0+} \cdot T] + \sum_{\substack{k,l \\ k \neq l \\ \text{ungerade}}} \exp[-E_{2+;k,l} \cdot T] + 4\text{-F-Anr.} + \dots \\
 &\quad + \sum_{\substack{k \\ \text{ungerade}}} \exp[-E_{1+;k} \cdot T] + \sum_{\substack{k,l,m \\ k \neq l \neq m \neq k \\ \text{ungerade}}} \exp[-E_{3+;k,l,m} \cdot T] + 5\text{-F-Anr.} + \dots \\
 &= \langle 0+ | e^{-HT} | 0+ \rangle + \sum_{\substack{k \\ \text{ungerade}}} \langle 1+; k | e^{-HT} | 1+; k \rangle \\
 &\quad + \sum_{\substack{k,l \\ k \neq l \\ \text{ungerade}}} \langle 2+; k, l | e^{-HT} | 2+; k, l \rangle + \sum_{\substack{k,l,m \\ k \neq l \neq m \neq k \\ \text{ungerade}}} \langle 3+; k, l, m | e^{-HT} | 3+; k, l, m \rangle \\
 &\quad + 4\text{-F-Anr.} + 5\text{-F-Anr.} + \dots
 \end{aligned}$$

Hier wird über das komplette Anregungsspektrum ungerader Impulse summiert.

Nun kann sich den eigentlich interessierenden Spin-Zustandssummen zugewandt werden.

6.2.4 Spin-Zustandssummen $Z_{\tau_x \tau_t}$

Aus den bisherigen Ergebnissen lassen sich die Spin-Zustandssummen $Z_{\tau_x \tau_t}$ zusammenstellen. Dies kann zum Einen über die Y_α^δ nach (3.21), (3.23), (3.25) und (3.27) geschehen, zum Anderen über die $Z_{\epsilon_x \epsilon_t}^F$ gemäß (4.82)-(4.85).

Unter den auftretenden Termen werden die für $T \gg 1$ dominierenden herausgefiltert.

$$Z_{++}'$$

$$Z_{++}' = Y_+^- + Y_-^+ = \frac{1}{2} (-Z_{++}^F + Z_{+-}^F + Z_{-+}^F + Z_{--}^F)$$

$$\begin{aligned}
 Z_{++}' &= \exp[-E_{0+} \cdot T] + \sum_{\substack{k,l \\ k \neq l \\ \text{ungerade}}} \exp[-E_{2+;k,l} \cdot T] + 4\text{-F-Anr.} + \dots \\
 &\quad + \exp[-E_{0-} \cdot T] + \sum_{\substack{k,l \\ k \neq l \\ \text{gerade}}} \exp[-E_{2-;k,l} \cdot T] + 4\text{-F-Anr.} + \dots
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 &= \langle 0+ | e^{-HT} | 0+ \rangle + \langle 0- | e^{-HT} | 0- \rangle \\
 &+ \sum_{\substack{k,l \\ k \neq l \\ \text{ungerade}}} \langle 2+; k, l | e^{-HT} | 2+; k, l \rangle + \sum_{\substack{k,l \\ k \neq l \\ \text{gerade}}} \langle 2-; k, l | e^{-HT} | 2-; k, l \rangle \\
 &+ 4\text{-F-Anr.} + \dots
 \end{aligned}$$

Hiermit bestätigt sich der geäußerte Zusammenhang

$$\tau_x = +1 \iff \text{geradzahlige Fermionanregungen}.$$

Dieses Ergebnis deckt sich zudem mit den bisherigen Resultaten aus den Kapiteln 2.2.10 und 5.1. In der Zustandssumme sind dabei sämtliche Impulse bzw. Impulskombinationen vertreten.

Bei der Diskussion des zugehörigen Spektrums in 2.2.10 wurde bereits festgestellt, daß die hier durch die Grundzustände gekennzeichneten Beiträge deutlich dominant sind für $T \gg 1$. Angeregte Fermionzustände stellen daher lediglich exponentielle Korrekturen dar.

Unter Verwendung der Notation (6.1) kann Z'_{++} somit für $T \gg 1$ geschrieben werden als

$$Z'_{++} = \langle \Omega | e^{-HT} | \Omega \rangle + O(2\text{-F-Anr.}) . \quad (6.3)$$

Z_{+-}

$$Z'_{+-} = Y_+^- - Y_-^+ = \frac{1}{2} (+Z_{++}^F - Z_{+-}^F + Z_{-+}^F + Z_{--}^F)$$

$$\begin{aligned}
 Z'_{+-} &= \exp[-E_{0+} \cdot T] + \sum_{\substack{k,l \\ k \neq l \\ \text{ungerade}}} \exp[-E_{2+;k,l} \cdot T] + 4\text{-F-Anr.} + \dots \\
 &- \exp[-E_{0-} \cdot T] - \sum_{\substack{k,l \\ k \neq l \\ \text{gerade}}} \exp[-E_{2-;k,l} \cdot T] - 4\text{-F-Anr.} - \dots
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 &= \langle 0+ | e^{-HT} | 0+ \rangle - \langle 0- | e^{-HT} | 0- \rangle \\
 &+ \sum_{\substack{k,l \\ k \neq l \\ \text{ungerade}}} \langle 2+; k, l | e^{-HT} | 2+; k, l \rangle - \sum_{\substack{k,l \\ k \neq l \\ \text{gerade}}} \langle 2-; k, l | e^{-HT} | 2-; k, l \rangle \\
 &\pm 4\text{-F-Anr.} \quad \pm \dots
 \end{aligned}$$

Wie zu erwarten, treten auch hier wegen $\tau_x = +1$ nur geradzahlige Fermionanregungen auf. Aufgrund antiperiodischer RB in t -Richtung $\tau_t = -1$ (Einbau des Umkehroperators) werden die Beiträge mit unterschiedlichen Vorzeichen gewichtet.

Unter Vernachlässigung der Zwei-Fermion-Anregungen (und höherer) ergibt sich bei $T \gg 1$ wie in Abschnitt 5.1

$$Z'_{+-} = \langle 0+ | e^{-HT} | 0+ \rangle - \langle 0- | e^{-HT} | 0- \rangle + O(2\text{-F-Anr.}) . \quad (6.4)$$

$$\boxed{Z_{-+}} \quad Z'_{-+} = Y_-^- + Y_+^+ = \frac{1}{2} (+Z_{++}^F + Z_{+-}^F - Z_{-+}^F + Z_{--}^F)$$

$$\begin{aligned}
 Z'_{-+} &= \sum_{\substack{k \\ \text{ungerade}}} \exp[-E_{1+;k} \cdot T] + \sum_{\substack{k,l,m \\ k \neq l \neq m \neq k \\ \text{ungerade}}} \exp[-E_{3+;k,l,m} \cdot T] + 5\text{-F-Anr.} + \dots \\
 &+ \sum_{\substack{k \\ \text{gerade}}} \exp[-E_{1-;k} \cdot T] + \sum_{\substack{k,l,m \\ k \neq l \neq m \neq k \\ \text{gerade}}} \exp[-E_{3-;k,l,m} \cdot T] + 5\text{-F-Anr.} + \dots \\
 &= \sum_{\substack{k \\ \text{ungerade}}} \langle 1+; k | e^{-HT} | 1+; k \rangle + \sum_{\substack{k \\ \text{gerade}}} \langle 1-; k | e^{-HT} | 1-; k \rangle \\
 &+ \sum_{\substack{k,l,m \\ k \neq l \neq m \neq k \\ \text{ungerade}}} \langle 3+; k, l, m | e^{-HT} | 3+; k, l, m \rangle + \sum_{\substack{k,l,m \\ k \neq l \neq m \neq k \\ \text{gerade}}} \langle 3-; k, l, m | e^{-HT} | 3-; k, l, m \rangle \\
 &+ 5\text{-F-Anr.} + \dots
 \end{aligned}$$

Dieses Ergebnis entspricht dem erwarteten Zusammenhang

$$\tau_x = -1 \iff \text{ungeradzahlige Fermionanregungen}.$$

Auch hier sind sämtliche Impulse vertreten.

Die Frage nach den dominierenden Beiträgen muß hier etwas genauer formuliert werden. Im ungeraden Anregungsspektrum $E_{n\pm;k_1,\dots,k_n}$ mit $n = 1, 3, 5, \dots$ treten aufgrund der verschiedenen Impulse ganze Bänder auf, die jeweils zu einer n -Fermion-Anregung mit festem n gehören. Am niedrigsten liegt das Ein-Fermion-Band mit $E_{1\pm;k}$, darüber das Drei-Fermion-Band mit $E_{3\pm;k,l,m}$; dabei überlappt der obere Teil des Ein-Fermion-Bands mit dem unteren des Drei-Fermion-Bands. Dies macht sich daran bemerkbar, daß die Energie einer 3-Fermion-Anregung mit drei kleinen Impulsen um Null durchaus kleiner sein kann als die Energie einer 1-Fermion-Anregung mit großem Impuls $k \approx L$ (bei passenden Werten für L und β , z.B. $L = 100$ und $\beta = 0,5$): $E_{1-;L} > E_{3-;0,2,4}$. Der Bänderüberlapp ist auch dem graphisch umgesetzten Spektrum von Z_{-+} in den Abbildungen 6.3 und 6.4 zu entnehmen.

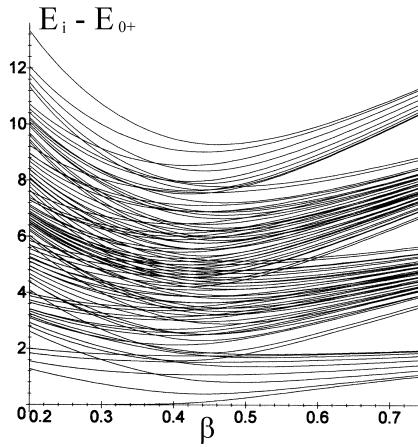


Abbildung 6.3: Spektrum $E_{n\pm}$ von Z_{-+} für $L = 8$
($\beta > \beta_C$: $n = 1, 3, 5, 7$)

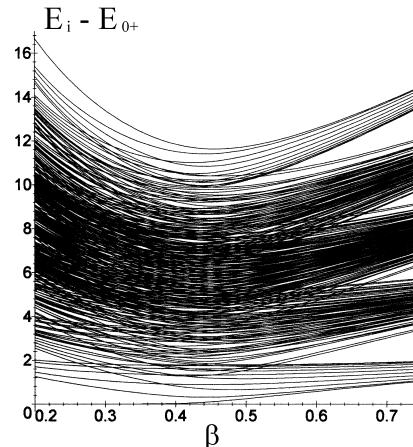


Abbildung 6.4: Spektrum $E_{n\pm}$ von Z_{-+} für $L = 10$
($\beta > \beta_C$: $n = 1, 3, 5, 7, 9$)

Das Augenmerk ist auf den interessierenden Temperaturbereich $\beta > \beta_C$ zu richten, in dem sich das beschriebene Verhalten zeigt. (Für $\beta < \beta_C$ treten andere Anregungen bezüglich H^- auf, da das Vorzeichen von ε_0 wechselt; man erkennt dies am Abknicken der Kurven.)

Diesen Abbildungen läßt sich aber auch entnehmen, daß der untere Teil des 1-Fermion-Bands den deutlichsten Beitrag zur Zustandssumme darstellt. Zur Abschätzung der dominanten Ausdrücke in Z_{-+} werden daher die einzeln darin auftretenden Summen, zu n -Fermion-Anregungen mit jeweils festem n gehörend, gegeneinander abgewogen. Auf diese Weise ist es zulässig, das gesamte

1-Fermion-Band mit dem gesamten 3-Fermion-Band zu vergleichen.

Aus diesem Vergleich geht eindeutig die Summe der 1-Fermion-Anregungen als dominanter Beitrag zu Z_{-+} hervor. Bei Vernachlässigung der höheren Anregungen ($n \geq 3$) für $T \gg 1$ erhält man somit unter Verwendung der Notation (6.2)

$$Z'_{-+} = \sum_{k=0}^{2L-1} \langle 1; k | e^{-HT} | 1; k \rangle + O(3\text{-F-Anr.}) . \quad (6.5)$$

Mit (6.3) und (6.5) bestätigt sich also, was sich bereits angedeutet hatte: Die Zustandssumme Z_{++} bei periodischen RB in x -Richtung $\tau_x = +1$ ist hauptsächlich durch die Grundzustände (0-Fermion-Anregungen) geprägt, während die Zustandssumme Z_{-+} für antiperiodische RB $\tau_x = -1$ im wesentlichen durch 1-Fermion-Anregungen bestimmt ist.

Eine genauere Untersuchung von Z_{++} und Z_{-+} , wobei im Blickpunkt deren Verhältnis steht, erfolgt im nächsten Unterkapitel 6.3.

Zur Vervollständigung sei noch die Zustandssumme Z_{--} aufgeführt:

$$\boxed{Z_{--}} \quad Z'_{--} = -Y_-^- + Y_+^+ = \frac{1}{2} (+Z_{++}^F + Z_{+-}^F + Z_{-+}^F - Z_{--}^F)$$

$$\begin{aligned} Z'_{--} &= - \sum_{\substack{k \\ \text{ungerade}}} \exp[-E_{1+;k} \cdot T] - \sum_{\substack{k,l,m \\ \text{ungerade}}} \exp[-E_{3+;k,l,m} \cdot T] - 5\text{-F-Anr.} - \dots \\ &\quad + \sum_{\substack{k \\ \text{gerade}}} \exp[-E_{1-;k} \cdot T] + \sum_{\substack{k,l,m \\ \text{gerade}}} \exp[-E_{3-;k,l,m} \cdot T] + 5\text{-F-Anr.} + \dots \\ &= - \sum_{\substack{k \\ \text{ungerade}}} \langle 1+; k | e^{-HT} | 1+; k \rangle + \sum_{\substack{k \\ \text{gerade}}} \langle 1-; k | e^{-HT} | 1-; k \rangle \\ &\quad - \sum_{\substack{k,l,m \\ \text{ungerade}}} \langle 3+; k, l, m | e^{-HT} | 3+; k, l, m \rangle + \sum_{\substack{k,l,m \\ \text{gerade}}} \langle 3-; k, l, m | e^{-HT} | 3-; k, l, m \rangle \\ &\quad \pm 5\text{-F-Anr.} \pm \dots \end{aligned}$$

Wegen $\tau_x = -1$ treten auch hier nur ungeradzahlige Fermion-Anregungen auf, die aufgrund von $\tau_t = -1$ (Umkehroperator) mit unterschiedlichen Vorzeichen versehen sind.

Unter Vernachlässigung der 3-Fermion-Anregungen (und höherer) ergibt sich für $T \gg 1$

$$\begin{aligned} Z'_{--} = & - \sum_{\substack{k \\ \text{ungerade}}} \langle 1+; k | e^{-HT} | 1+; k \rangle + \sum_{\substack{k \\ \text{gerade}}} \langle 1-; k | e^{-HT} | 1-; k \rangle \\ & + O(3\text{-F-Anr.}) . \end{aligned} \quad (6.6)$$

Z_{--} ist positiv, da die 1-Fermion-Anregungen für gerade k ein wenig schwerer wiegen. (Siehe Abb. 6.3 und 6.4: Man erkennt dies daran, daß die abknickenden Kurven jeweils energetisch tiefer liegen; wegen $\varepsilon_0 \rightarrow -\varepsilon_0$ gehören diese zu geraden k .)

6.3 Aufstellung der Energieaufspaltung $\widehat{\Delta E}$ über das Verhältnis von Z_{-+} und Z_{++}

In diesem Abschnitt gelingt es, aus den zuletzt erzielten Formulierungen der Zustandssummen einen Ausdruck für eine Energieaufspaltung $\widehat{\Delta E}$ zu gewinnen. Der hier aufgestellte Ausdruck stellt sich dabei als Alternative zur bisherigen Formulierung in Kapitel 5 heraus. Beim Vergleich mit dem dort erhaltenen ΔE ist aus Symmetriegründen die Vertauschung $L \leftrightarrow T$ zu beachten.

6.3.1 Verhältnis der Zustandssummen

Ausgangspunkt zur Aufstellung der Energieaufspaltung $\widehat{\Delta E}$ ist das Verhältnis der Zustandssummen Z_{-+} (6.5) und Z_{++} (6.3)

$$\frac{Z_{-+}}{Z_{++}} \sim \frac{\sum_k \langle 1; k | e^{-HT} | 1; k \rangle}{\langle \Omega | e^{-HT} | \Omega \rangle} \quad (6.7)$$

$$\sim \frac{\sum_{\text{gerade}} \exp[-E_{1-,k} \cdot T] + \sum_{\text{ungerade}} \exp[-E_{1+,k} \cdot T]}{\exp[-E_{0-} \cdot T] + \exp[-E_{0+} \cdot T]} \quad (6.8)$$

bei antiperiodischen ($\tau_x = -1$) und periodischen ($\tau_x = +1$) Randbedingungen in x -Richtung in der zuvor vorgenommenen Charakterisierung über Fermionanregungen.

Die Zustandssumme bei periodischen RB ist dabei durch die Grundzustandsbeiträge geprägt bei Vernachlässigung der 2-, 4-, 6-, ...-Fermion-Anregungen. Z_{-+} wird hingegen durch 1-Fermion-Anregungen dominiert unter Vernachlässigung der 3-, 5-, 7-, ...-Fermion-Beiträge. Diese höheren Anregungsbeiträge sind zwar vergleichsweise gering (besonders für $T \gg 1$), aber prinzipiell in den Zustandssummen enthalten.

6.3. Aufstellung der Energieaufspaltung $\widehat{\Delta E}$ über das Verhältnis von Z_{-+} und Z_{++}

Dies legt folgende Vermutung nahe, die in das Bild der bisher gefundenen Zusammenhänge paßt: Im Grundzustand (0 angeregte Fermionen) sind die Spins parallel zueinander ausgerichtet; im Spin-Gitter tritt demzufolge keine Grenzfläche auf, das sich somit periodisch fortsetzen läßt: Dieses ist der dominante Beitrag zu Z_{++} . Bei einer Grenzfläche (\leftrightarrow einem angeregten Fermion) ist eine periodische Fortsetzung des Gitters nicht möglich, lediglich die antiperiodische RB kann realisiert werden: Hierdurch ist der dominante Beitrag zu Z_{-+} gegeben. Bei einer geraden Anzahl an Grenzflächen (\leftrightarrow 2-, 4-, 6-, ...-Fermion-Anregungen) ist wiederum eine periodische Abfolge des Gitters möglich, was die höheren Anteile zu Z_{++} erklärt; diese 2-, 4-, 6-, ...-Kink-Konfigurationen treten jedoch mit einer wesentlich geringeren Wahrscheinlichkeit auf und tragen dementsprechend schwach zu Z_{++} bei. In Z_{-+} sind entsprechend schwächere Beiträge von 3, 5, 7, ... Grenzflächen (Kinks) enthalten.

Untersuchungen zu Multikink-Anordnungen im Rahmen der Feldtheorie findet man u.a. in [56], wo auf die Beiträge zu Pfadintegralen eingegangen wird.

Die in (6.7), (6.8) erfolgte Einschränkung auf 0- und 1-Fermion-Anregungen entspricht daher dem Fehlen und dem Vorhandensein genau einer Grenzfläche senkrecht zur x -Richtung (siehe Abb. 6.2), wie es ursprünglich angedacht war, und was für die folgenden Zwecke auch völlig ausreichend sein wird.

6.3.2 Bezug zu einer Energieaufspaltung

Um diesen herzustellen, sei zunächst an das Bewährte aus Kapitel 5 erinnert: Die Energieaufspaltung ergab sich dort als Energiefülle über die Differenz

$$\Delta E = E_{0-} - E_{0+} = \frac{1}{2} \left\{ \sum_{k=0}^{L-1} \varepsilon\left(\frac{2k+1}{L}\right) - \sum_{k=0}^{L-1} |\varepsilon\left(\frac{2k}{L}\right)| \right\}.$$

Hierzu korrespondierte eine Grenzfläche senkrecht zur t -Richtung, wie sie in Abb. 5.2 bzw. in Abb. 6.5 auf der linken Seite gezeigt ist. Durch deren Betrachtung erzielte man den Zusammenhang (5.8):

$$\frac{Z_{+-}}{Z_{++}} \sim \frac{T}{2} \Delta E.$$

Diese Überlegungen fanden in Darstellung I statt.

Nun könnte man dieselben Überlegungen analog in Darstellung II durchführen und dort die Energiefülle

$$\widehat{\Delta E} = \widehat{E}_{0-} - \widehat{E}_{0+} = \frac{1}{2} \left\{ \sum_{r=0}^{T-1} \widehat{\varepsilon}\left(\frac{2r+1}{T}\right) - \sum_{r=0}^{T-1} |\widehat{\varepsilon}\left(\frac{2r}{T}\right)| \right\}$$

berechnen; man erhielt damit dasselbe Ergebnis wie für ΔE (Darstellung I), wenn man aus Symmetriegründen (siehe (3.29)) L durch T ersetze.

Aus eben diesen Symmetriegründen (3.29) folgt hier die Zugehörigkeit zu einer Grenzfläche senkrecht zur x -Richtung (siehe Abb. 6.2); in Abb. 6.5 ist diese zum Vergleich auf der rechten Seite dargestellt. Über deren Einbeziehung ließe sich

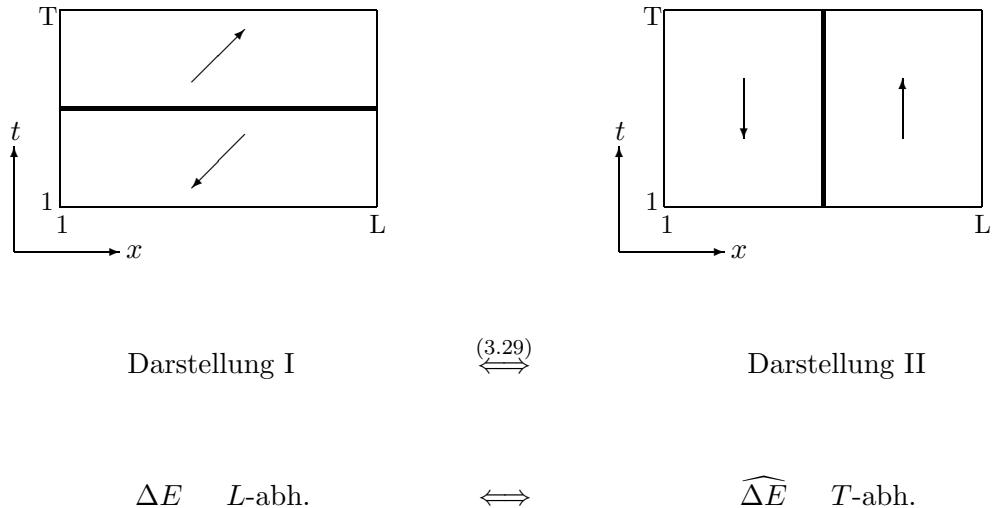


Abbildung 6.5: Zu ΔE und $\widehat{\Delta E}$ korrespondierende Grenflächen

folgender zu (5.8) analoger Zusammenhang finden:

$$\frac{\widehat{Z}_{-+}}{\widehat{Z}_{++}} \sim \frac{L}{2} \widehat{\Delta E}. \quad (6.9)$$

Soweit führte man das bekannte Verfahren in der solang nichts Neues hervorbringenden Darstellung II aus.

Das neuartige Verfahren kommt nun über den Äquivalenzbeweis zwischen Darstellung I und II ins Spiel: Wegen $\widehat{Z}_{-+} = Z_{-+}$ und $\widehat{Z}_{++} = Z_{++}$ gilt neben (6.9) ebenfalls:

$$\frac{Z_{-+}}{Z_{++}} \sim \frac{L}{2} \widehat{\Delta E}. \quad (6.10)$$

Auf der linken Seite stehen somit die im vorigen Abschnitt angesprochenen Zustandssummen aus Darstellung I. Ziel ist es nun, deren bereits andiskutiertes Verhältnis auf der linken Seite entsprechend umzuformen, um daraus einen Ausdruck für $\widehat{\Delta E}$ zu gewinnen.

Die Energieaufspaltung $\widehat{\Delta E}$ wird dabei (obwohl Darstellung I-Größen untersucht werden) weiterhin mit einem Dach versehen sein, um deren T -Abhängigkeit deutlich herauszustellen. Da die hier erfolgende Rechnung der Bestätigung des in Kapitel 5 erhaltenen Ergebnisses dient, sollte das Resultat für $\widehat{\Delta E}$ unter Beachtung der $L \leftrightarrow T$ -Vertauschung mit demjenigen für ΔE (5.32)-(5.34) identisch sein.

6.3. Aufstellung der Energieaufspaltung $\widehat{\Delta E}$ über
das Verhältnis von Z_{-+} und Z_{++}

6.3.3 Energieaufspaltung: Integral über Fermion-Energien

Der Unterschied zwischen den am Verhältnis (6.8) beteiligten Zustandssummen liegt in den 1-fachen Anregungen, die der Zähler gegenüber dem Nenner aufweist.

Mittels

$$E_{1\pm;k} = E_{0\pm} + |\varepsilon_k| \quad \text{für } \begin{cases} k \text{ ungerade} \\ k \text{ gerade} \end{cases}$$

wird dieser durch Abtrennung der Grundzustandsanteile direkt sichtbar:

$$\frac{Z_{-+}}{Z_{++}} \sim \frac{e^{-E_{0-}\cdot T} \sum_{k \text{ gerade}} \exp[-|\varepsilon_k| \cdot T] + e^{-E_{0+}\cdot T} \sum_{k \text{ ungerade}} \exp[-|\varepsilon_k| \cdot T]}{e^{-E_{0-}\cdot T} + e^{-E_{0+}\cdot T}}.$$

Um die Sprachweise eindeutig zu gestalten, sollten die ε_k eigentlich als normierte Ein-Fermion-Energien bezeichnet werden; für ein angeregtes Fermion repräsentieren sie ja den Abstand zur jeweiligen Grundzustandsenergie. Soweit keine Verwechslungsgefahr besteht, kann aber zum früheren, schlichteren Begriff der (einzelnen) Fermion-Energien zurückgekehrt werden. Wie üblich darf bei ungeraden k ein Betragsstrich ganz nach Bedarf gesetzt werden.

Zur weiteren Auswertung ist hilfreich zu bedenken, daß letztlich ein Ausdruck der Energieaufspaltung bei großen L, T gesucht ist. Daher ($L, T \gg 1$) empfiehlt sich für die im Zähler auftretenden Summen über normierte Ein-Fermion-Energien der Übergang von der Summation zur Integration. Da für diesen Schritt eine (quasi-) kontinuierliche Variable formal geeigneter ist, wird auf $x = \frac{k}{L}$ sowie $|\varepsilon(x)|$ (siehe Gl. (5.13)) zurückgegriffen.

$$\sum_{\substack{k=0 \\ \text{gerade}}}^{2L-2} \exp[-|\varepsilon_k| \cdot T] \longrightarrow \frac{1}{\Delta(\frac{k}{L})} \int_0^{\frac{2L-2}{L}} d(\frac{k}{L}) \exp[-|\varepsilon(\frac{k}{L})| \cdot T].$$

Das Rastervolumen $\Delta(\frac{k}{L}) = \frac{1}{L} \Delta k$ beträgt offenkundig $\Delta(\frac{k}{L}) = \frac{2}{L}$, da der Index k Zweiersprünge macht ($\Delta k = 2$). Zudem kann für große L die obere Grenze zu $\frac{2L-2}{L} \approx 2$ abgeschätzt werden:

$$\sum_{\substack{k=0 \\ \text{gerade}}}^{2L-2} \exp[-|\varepsilon_k| \cdot T] \longrightarrow \frac{L}{2} \int_0^2 dx \exp[-|\varepsilon(x)| \cdot T].$$

Die beim Übergang von der Summation zur Integration auftretenden Korrekturterme lassen sich mithilfe der Euler-MacLaurin-Summationsformel [60] (Kap. 23.1.30, siehe auch 23.1.32) abschätzen: Durch geeignete Verschiebung des Integrationsbereichs ergeben sich als Korrektur lediglich Randterme der Ordnung

$$O(\exp[-|\varepsilon(\pm 1)| \cdot T]) = O(\exp[-2(\beta + \tilde{\beta}) \cdot T]). \quad (6.11)$$

Diese exponentiell abfallende Ordnung trat bereits im vorigen Kapitel auf und ist gegenüber den im Endergebnis vorkommenden Ordnungen vernachlässigbar.

Auf ähnliche Weise wird von diversen Autoren [9, 61] der Übergang zur Integration beim größten Eigenwert diskutiert. Onsager selbst begründete die rasche Konvergenz mit lediglich exponentiellen Korrekturen über die Trapezformel, in anderen Bezügen wird ebenfalls die Euler-MacLaurin-Summationsformel angeführt (siehe [17]).

Für ungerade Impulse bleibt das Rastervolumen $\Delta(\frac{k}{L}) = \frac{2}{L}$ gleich, womit sich wegen $\frac{1}{L} \approx 0$ und $\frac{2L-1}{L} \approx 2$ dasselbe Integral ergibt:

$$\sum_{\substack{k=1 \\ \text{ungerade}}}^{2L-1} \exp[-\varepsilon_k \cdot T] \longrightarrow \frac{L}{2} \int_0^2 dx \exp[-|\varepsilon(x)| \cdot T].$$

Man erkennt also insbesondere, daß sich die Summen über gerade und ungerade Impulse für große L gleichen. Dies ist nicht weiter überraschend, da nach früheren Überlegungen $\lim_{L \rightarrow \infty} |\varepsilon_{2k}| = \lim_{L \rightarrow \infty} \varepsilon_{2k+1}$ gilt. Andererseits tritt hierüber ein deutlicher Unterschied der Berechnungsmethoden zutage: Bei der bisherigen Berechnung der Energiedifferenz $\Delta E = E_{0-} - E_{0+}$ als eben solche mußte diese Differenz zunächst in eine Summe umgeschrieben werden, da der Ausdruck für große L sonst direkt Null ergeben hätte. Hier tritt jedoch keine derartige Differenz auf, und die Teilausdrücke können daher getrennt für $L \gg 1$ untersucht bzw. bereits in Integrale umgewandelt werden.

Die im Nenner befindlichen Grundzustandsbeiträge können somit gekürzt werden (für große L werden auch diese einander gleichen, man denke nur an $\lim_{L \rightarrow \infty} \Delta E = 0$), so daß sich für das Verhältnis der Zustandssummen

$$\frac{Z_{-+}}{Z_{++}} \sim \frac{L}{2} \int_0^2 dx \exp[-|\varepsilon(x)| \cdot T] \quad (6.12)$$

ergibt. Es verbleiben also die Energie-Konfigurationen normierter 1-Fermion-Zustände.

Mittels (6.10) gewinnt man damit folgenden Ausdruck für die Energieaufspaltung:

$$\widehat{\Delta E} = \int_0^2 dx \exp[-|\varepsilon(x)| \cdot T]. \quad (6.13)$$

Zur späteren Zweckmäßigkeit wurde hier ob der vernachlässigbaren Korrekturen wieder ein Gleichheitszeichen gesetzt; man sollte jedoch in Erinnerung behalten, daß in diese Gleichung gewisse Näherungen einflossen.

Diese Formel, auf die die bisherigen Überlegungen abzielten, ist auch der Ausgangspunkt der weiteren Rechnungen in diesem Kapitel. Offensichtlich unterscheidet sich dieser Ausdruck von der früheren Formulierung der Energieaufspaltung. Dessen Berechnung sollte daher neue Aufschlüsse bieten und, bei Erfolg, die bisherigen Ergebnisse auf nicht-triviale Weise bestätigen.

Im Anschluß wird dieses Integral (6.13) im Zuge einer Sattelpunktsapproximation ausgewertet.

6.4 Berechnung des Integrals $\widehat{\Delta E}$

Gegenstand ist die Berechnung der Energieaufspaltung $\widehat{\Delta E}$ als Integral über die normierten Ein-Fermion-Energie-Konfigurationen

$$\widehat{\Delta E} = \int_0^2 dx \exp[-|\varepsilon(x)| \cdot T]$$

mit $|\varepsilon(x)| = +\text{Arcosh}[\cosh(m_0) + 1 - \cos(\pi x)]$.

Die hierbei eine zentrale Rolle spielende Funktion $|\varepsilon(x)|$, die die verschiedenen Fermionenergien repräsentiert, wird hierzu in der angegebenen Form verwendet. Man erkennt bereits die reine T -Abhängigkeit des für $\widehat{\Delta E}$ resultierenden Ausdrucks. Wie zuvor interessiert auch hier ein Ausdruck bei einer großen Zahl an Freiheitsgraden, sprich großen T .

6.4.1 Vorbereitungen

Bei Betrachtung des Integranden $\exp[-|\varepsilon(x)| \cdot T]$ ist auffällig, daß dieser Schwankungen durch $|\varepsilon(x)|$ ausgesetzt ist, die für $T \gg 1$ erhebliche Ausmaße annehmen. Insofern bietet sich für $T \gg 1$ eine Sattelpunktsapproximation an, die um das Maximum des Integranden und dementsprechend um das Minimum m_0 der Funktion $|\varepsilon(x)|$ stattfindet. Da $|\varepsilon(x)|$ ein periodisches Verhalten aufweist, verlangt dies allerdings zunächst die Verschiebung bzw. Einschränkung auf ein geeignetes Integrationsintervall, in welchem ein einzelnes und eindeutiges Minimum mit passendem Flankenanstieg vorliegt. Diese gelingt unter Ausnutzung eben der Periodizität $|\varepsilon(2 \pm x)| = |\varepsilon(x)|$:

$$\begin{aligned} \int_0^2 dx \exp[-|\varepsilon(x)| \cdot T] &= \int_{-1}^1 dx \exp[-|\varepsilon(x)| \cdot T] \\ &= 2 \cdot \int_0^1 dx \exp[-|\varepsilon(x)| \cdot T]. \end{aligned} \quad (6.14)$$

Zur schematischen Veranschaulichung dieser Zusammenhänge und des verfolgten Vorgehens diene die Abbildung 6.6 (in Anlehnung an Abb. 2.6). Um bei späteren Substitutionen die Bijektivität der Integrationsintervalle zueinander zu gewährleisten, wird von vornherein die zuletzt aufgeführte Grenzenvariante gewählt.

Somit ist für den weiteren Verlauf eine um das bei $x = 0$ befindliche Minimum geplante Entwicklung

$$\widehat{\Delta E} = 2 \cdot \int_0^1 dx \exp[-|\varepsilon(x)|_{x=0}^{\text{um}} \cdot T] \quad (6.15)$$

festzuhalten. Die Indizierung „ $_{x=0}^{\text{um}}$ “ soll darauf hinweisen, daß $|\varepsilon(x)|_{x=0}^{\text{um}}$ eine um diese Stelle genäherte Größe darstellt, die insbesondere nicht mehr die Periodizität der ursprünglichen Funktion aufweist, sondern einen steten Flankenanstieg.

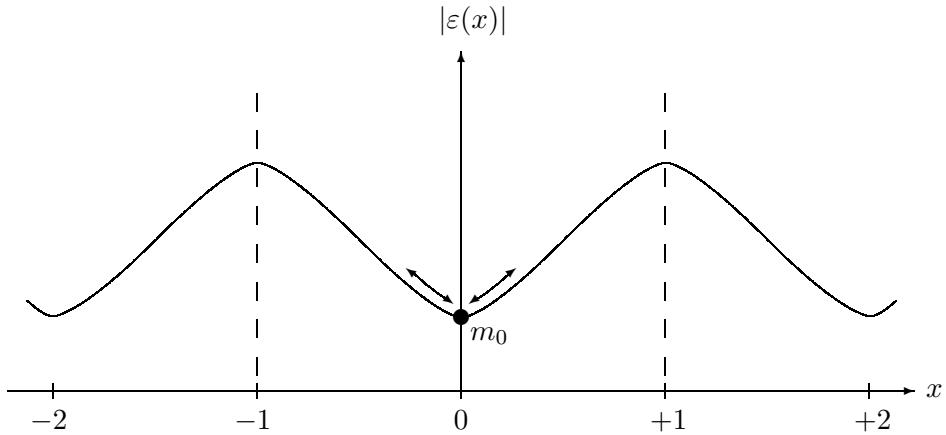


Abbildung 6.6: Entwicklung um ein ausgewähltes Minimum (schematisch)

Anhand des Minimums $|\varepsilon(0)| = m_0$ lässt sich bereits der zu erwartende Trend

$$\widehat{\Delta E} \sim \exp(-T m_0)$$

absehen. Die restliche Entwicklung sollte demnach die potenzartig von T abhängenden Vorfaktoren enthalten, welche nun explizit durchgeführt wird.

6.4.2 Sattelpunktsapproximation

Zu deren Ausführung wird die Taylorentwicklung von $|\varepsilon(x)|$ um $x = 0$ benötigt, welche hier bis zur Ordnung $O(x^6)$ angegeben wird. Wie sich sogleich zeigen wird, reicht diese aus, um die bisherigen Ergebnisse bis zu derselben Ordnungstiefe zu reproduzieren. Da die Funktion $|\varepsilon(x)| = |\varepsilon(-x)|$ achsensymmetrisch ist, treten nur gerade Potenzen auf:

$$\begin{aligned} |\varepsilon(x)|_{\substack{\text{um} \\ x=0}} &= m_0 + \frac{\pi^2}{2 \sinh(m_0)} \cdot x^2 - \frac{\pi^4}{24} \left(\frac{1}{\sinh(m_0)} + \frac{3 \cosh(m_0)}{\sinh^3(m_0)} \right) \cdot x^4 \\ &\quad + \frac{\pi^6}{6!} \left(\frac{1}{\sinh(m_0)} + \frac{15(\cosh(m_0) - 1)}{\sinh^3(m_0)} + \frac{45 \cosh^2(m_0)}{\sinh^5(m_0)} \right) \cdot x^6 + O(x^8) \end{aligned}$$

bzw. in Kurzform

$$|\varepsilon(x)|_{\substack{\text{um} \\ x=0}} = m_0 + \frac{\pi^2}{2 \sinh(m_0)} \cdot x^2 + \text{Rest}(x).$$

Letztere soll das weitere, für eine Sattelpunktsintegration typische Entwicklungsschema von (6.15) aufzeigen, welches um die aus der quadratischen Ordnung stammende Gaußfunktion stattfindet:

$$\widehat{\Delta E} = \exp(-T m_0) \cdot 2 \int_0^1 dx \exp \left[-\frac{T \pi^2}{2 \sinh(m_0)} \cdot x^2 \right] \exp[-T \cdot \text{Rest}(x)].$$

6.4. Berechnung des Integrals $\widehat{\Delta E}$

Um die in $\text{Rest}(x)$ enthaltenen, wegen $x \ll 1$ schwächeren Ordnungen in einem analytischen Rahmen zu behandeln, wird $\exp[-T \cdot \text{Rest}(x)]$ nach Taylor um Eins entwickelt:

$$\exp[-T \cdot \text{Rest}(x)] = 1 - T \cdot \text{Rest}(x) + \frac{1}{2} T^2 \cdot \text{Rest}^2(x) + T^3 \cdot O[\text{Rest}^3(x)].$$

Auf diese Weise verbleiben letztlich Integrale über Gaußfunktionen mit Polynomen, welche nach Verschiebung der Integrationsgrenze ins Unendliche den gängigen Standardwerken zu entnehmen sind. Hierzu ist folgende Abschätzung hilfreich:

$$\begin{aligned} \int_0^1 dx \exp[-\alpha x^2] \{1 + O(x^4)\} &= \int_0^\infty dx \exp[-\alpha x^2] \{1 + O(x^4)\} \\ &\quad - \int_1^\infty dx \exp[-\alpha x^2] \{1 + O(x^4)\} \end{aligned}$$

$$\text{mit } \alpha = \frac{T \pi^2}{2 \sinh(m_0)}, \text{ d.h. von der Ordnung } T;$$

$$\begin{aligned} \int_1^\infty dx \exp[-\alpha x^2] \{1 + O(x^4)\} &\stackrel{y=x^{-1}}{=} \int_0^\infty dy \exp[-\alpha(y+1)^2] \{1 + O((y+1)^4)\} \\ &\leq \exp[-\alpha] \cdot \int_0^\infty dy \exp[-\alpha y^2] \cdot \text{const.} \{1 + O(y)\}. \end{aligned}$$

Der Korrekturterm ist somit um Faktor $O(\exp[-\alpha]) = O(\exp[-\frac{T \pi^2}{2 \sinh(m_0)}])$ geringer. Anschaulich wird in diesem auch nur noch über den flachen Ausläufer einer um $x=0$ zentrierten Gaußglocke integriert, die bei $x=1$ bereits um eben dieses $O(\exp[-\alpha])$ abgefallen ist. Ergänzend sei an die Abschätzung über das Fehlerintegral $\text{erf}(x)$ [59] erinnert.

Für $T \gg 1$ ist daher diese exponentiell abfallende Ordnung vernachlässigbar (m_0 sei hierzu hinreichend klein, bzw. da m_0 als endlich vorausgesetzt wurde, kann $T \gg 1$ entsprechend größer gewählt werden) gegenüber den aus der restlichen Approximation

$$\widehat{\Delta E} = 2 \cdot \int_0^\infty dx \exp[-|\varepsilon(x)| \cdot T] \Big|_{\substack{\text{Gauß} \\ x=0}} \cdot \left[1 + O(\exp[-\frac{T \pi^2}{2 \sinh(m_0)}]) \right]$$

kommenden potenzartigen Termen in T .

Explizit erhält man durch Einsetzen der Taylorentwicklungen in das obige Auswertungsschema:

$$\begin{aligned}
 \widehat{\Delta E} = & \exp(-T m_0) \cdot 2 \int_0^\infty dx \exp\left[-\frac{T \pi^2}{2 \sinh(m_0)} \cdot x^2\right] \cdot \\
 & \left\{ 1 + T \cdot \frac{\pi^4}{24} \left(\frac{1}{\sinh(m_0)} + \frac{3 \cosh(m_0)}{\sinh^3(m_0)} \right) \cdot x^4 \right. \\
 & - T \cdot \frac{\pi^6}{6!} \left(\frac{1}{\sinh(m_0)} + \frac{15(\cosh(m_0) - 1)}{\sinh^3(m_0)} + \frac{45 \cosh^2(m_0)}{\sinh^5(m_0)} \right) \cdot x^6 \\
 & + T \cdot O(x^8) + \frac{1}{2} T^2 \left[-\frac{\pi^4}{24} \left(\frac{1}{\sinh(m_0)} + \frac{3 \cosh(m_0)}{\sinh^3(m_0)} \right) \cdot x^4 + O(x^6) \right]^2 \\
 & \left. + T^3 [O(x^4)]^3 \right\} \left\{ 1 + O\left(\exp\left[-\frac{T \pi^2}{2 \sinh(m_0)}\right]\right) \right\}.
 \end{aligned}$$

Die Mitnahme höherer Ordnungen des Rests liegt darin begründet, daß die aus den Integralen resultierenden Ordnungen in T interessieren. Da der Exponent ebenfalls ein T enthält, sind diese jedoch nicht direkt ablesbar; so führt $T \cdot O(x^6)$ ebenso wie $T^2 \cdot O(x^8)$ aus dem quadratischen Restterm auf die Ordnung $O\left(\frac{1}{T^{5/2}}\right)$. Um die resultierenden Ordnungen in T deutlicher zu gestalten, empfiehlt sich daher die Substitution

$$y = \frac{T \pi^2}{2 \sinh(m_0)} \cdot x^2,$$

die das T aus dem Exponenten entfernt.

Unter Mitnahme der oben angegebenen Ordnungen erhält man

$$\begin{aligned}
 \widehat{\Delta E} = & \exp(-T m_0) \cdot \frac{\sqrt{2 \sinh(m_0)}}{\pi} \cdot \int_0^\infty dy \exp(-y) \frac{1}{\sqrt{y}} \cdot \\
 & \left\{ \frac{1}{\sqrt{T}} + \frac{1}{6} \left(\sinh(m_0) + \frac{3 \cosh(m_0)}{\sinh(m_0)} \right) \cdot y^2 \cdot \frac{1}{T^{3/2}} \right. \\
 & - \frac{1}{90} \left(\sinh^2(m_0) + 15(\cosh(m_0) - 1) + 45 \frac{\cosh^2(m_0)}{\sinh^2(m_0)} \right) \cdot y^3 \cdot \frac{1}{T^{5/2}} \\
 & + \frac{1}{72} \left(\sinh^2(m_0) + 6 \cosh(m_0) + 9 \frac{\cosh^2(m_0)}{\sinh^2(m_0)} \right) \cdot y^4 \cdot \frac{1}{T^{5/2}} \\
 & \left. + O\left(\frac{1}{T^{7/2}}\right) \right\} \left\{ 1 + O\left(\exp\left[-\frac{T \pi^2}{2 \sinh(m_0)}\right]\right) \right\}.
 \end{aligned}$$

Die verschiedenen Ordnungen in T sind nun deutlich sichtbar. Man erkennt, daß $O\left(\frac{1}{\sqrt{T}}\right)$ und $O\left(\frac{1}{T^{3/2}}\right)$ jeweils aus einer Quelle stammen, während $O\left(\frac{1}{T^{5/2}}\right)$ wie oben aufgezeigt aus zwei Quellen zusammengesetzt werden muß. Letzteres bedingt die Hinzunahme des quadratischen Restterms zumindest in seiner

niedrigsten Ordnungsstufe. Man mag nun einsehen, daß die Ausrechnung höherer Terme $O\left(\frac{1}{T^{n/2}}\right)$ durchaus verwickelt wird. Die Beschränkung auf die explizite Angabe bis einschließlich zur Ordnung $O\left(\frac{1}{T^{5/2}}\right)$ entspricht derjenigen in Kapitel 5.3 und ist damit auch ausreichend zum gegenseitigen Ergebnisvergleich.

Die verbleibenden Integrale sind vom Typ der Gammafunktionen [59]

$$\int_0^\infty dx \ x^n \exp(-x) = \Gamma(n+1) \quad \text{mit } n > -1; \quad (6.16)$$

in Anhang E sind die hier benötigten $\Gamma\left(\frac{2k+1}{2}\right)$ mit $k \in \mathbb{N}$ angegeben.

6.4.3 Ergebnis für die Energieaufspaltung $\widehat{\Delta E}$

Nach dem Ordnen und Zusammenfassen der verschiedenen Terme erhält man somit folgendes Endresultat für $\widehat{\Delta E}$:

$$\begin{aligned} \widehat{\Delta E} = & \exp(-T m_0) \left[\sqrt{\frac{2 \sinh(m_0)}{\pi}} \cdot \frac{1}{\sqrt{T}} + a_1 \frac{1}{T^{3/2}} + a_2 \frac{1}{T^{5/2}} + \right. \\ & \left. + O\left(\frac{1}{T^{7/2}}\right) \right] \left[1 + O\left(\exp\left[-\frac{T \pi^2}{2 \sinh(m_0)}\right]\right) \right] \end{aligned} \quad (6.17)$$

$$\text{mit } a_1 = \frac{1}{4\sqrt{2\pi}} \left(\sinh^{3/2}(m_0) + \frac{3 \cosh(m_0)}{\sqrt{\sinh(m_0)}} \right) \quad (6.18)$$

$$\begin{aligned} \text{und } a_2 = & \frac{1}{8\sqrt{2\pi}} \left(\frac{9}{8} \sinh^{5/2}(m_0) + \frac{15}{4} \cosh(m_0) \sqrt{\sinh(m_0)} + \right. \\ & \left. + 5 \sqrt{\sinh(m_0)} - \frac{15}{8} \frac{\cosh^2(m_0)}{\sinh^{3/2}(m_0)} \right). \end{aligned} \quad (6.19)$$

Erneut lässt sich nun ablesen, wie die Energieaufspaltung kontinuierlich mit wachsender Systemgröße abnimmt. Im Limes unendlich vieler Freiheitsgrade verschwindet sie: $\lim_{T \rightarrow \infty} \widehat{\Delta E} = 0$.

Vergleicht man dieses Ergebnis unter Beachtung der L - T -Vertauschung mit demjenigen für ΔE (5.32)-(5.34) aus Kapitel 5, so stellt man eine *hervorragende Übereinstimmung* der erzielten Resultate fest: Bis einschließlich zur Ordnung $O\left(\frac{1}{T^{5/2}}\right)$ bzw. $O\left(\frac{1}{L^{5/2}}\right)$ gleichen sich die berechneten Koeffizienten.

Hierbei sollte noch einmal betont werden, daß sich die in Kapitel 5 und 6 beschriebenen Verfahren grundlegend und nicht-trivial unterscheiden: *Die Übereinstimmung der erzielten Ergebnisse ist daher als wertvolle Bestätigung zu werten.*

Eine tiefergehende Untersuchung dieser Korrespondenz ist in Abschnitt 6.5 zu finden, die u.a. zeigt, daß der Unterschied in den angegebenen exponentiellen Korrekturtermen als nebensächlich und unbedeutend anzusehen ist.

Mithilfe der Wurzelnäherung für $|\varepsilon(x)|$, die sich als nützliche Approximation um den kritischen Punkt bewährt hat, soll diese Übereinstimmung auch für $O(\frac{1}{T^{7/2}})$ überprüft werden.

6.4.4 Überprüfung mit Wurzelnäherung

Bei der Berechnung der Energieaufspaltung

$$\widehat{\Delta E} = 2 \cdot \int_0^\infty dx \exp [- |\varepsilon(x)| \cdot T]_{\substack{\text{Gauß} \\ \text{um} \\ x=0}} \cdot [1 + O(\text{Korrektur})],$$

für welche die Entwicklung der Funktion $|\varepsilon(x)|$ um die Stelle $x = 0$ benötigt wird, kann erneut auf die Wurzelnäherung (5.42)

$$|\varepsilon(x)|_{\substack{\text{um} \\ x=0}} = \sqrt{m_0^2 + \pi^2 x^2} \quad \text{für } \beta \approx \beta_C$$

zurückgegriffen werden; diese gilt ja gerade für kleines Argument x sowie um den kritischen Punkt. Die Sattelpunktsapproximation kann dann mit dieser einfacheren Funktion durchgeführt werden, wofür man die Einschränkung $\beta \approx \beta_C$ bzw. $m_0 \ll 1$ in Kauf nimmt. Die Erleichterung aufgrund ihres unkomplizierteren Verhaltens ist hierbei nicht so groß wie bei der Methode der Schlitzintegration; allerdings ist die Taylorentwicklung mit geringerem Aufwand verbunden, so daß sie hier bis einschließlich $O(x^8)$ geführt wird:

$$\begin{aligned} \sqrt{m_0^2 + \pi^2 x^2} &= m_0 + \frac{\pi^2}{2m_0} \cdot x^2 - \frac{\pi^4}{8m_0^3} \cdot x^4 + \frac{\pi^6}{16m_0^5} \cdot x^6 \\ &\quad - \frac{5\pi^8}{128m_0^7} \cdot x^8 + O(x^{10}). \end{aligned}$$

Letztendlich soll das Endergebnis die explizite Angabe der Ordnung $O(\frac{1}{T^{7/2}})$ beinhalten. Im Entwicklungsschema werden hierzu folgende Terme benötigt:

$$\begin{aligned} \widehat{\Delta E} &= \exp(-T m_0) \cdot 2 \int_0^\infty dx \exp\left(-\frac{T \pi^2}{2m_0} \cdot x^2\right) \cdot \\ &\quad \left\{ 1 + T \cdot \frac{\pi^4}{8m_0^3} \cdot x^4 - T \cdot \frac{\pi^6}{16m_0^5} \cdot x^6 + T \cdot \frac{5\pi^8}{128m_0^7} \cdot x^8 + T \cdot O(x^{10}) \right. \\ &\quad \left. + \frac{1}{2} T^2 \left[-\frac{\pi^4}{8m_0^3} \cdot x^4 + \frac{\pi^6}{16m_0^5} \cdot x^6 + O(x^8) \right]^2 \right. \\ &\quad \left. - \frac{1}{3!} T^3 \left[-\frac{\pi^4}{8m_0^3} \cdot x^4 + O(x^6) \right]^3 + T^4 [O(x^4)]^4 \right\}. \end{aligned}$$

Auf die Angabe der exponentiellen Korrektur $\left\{ 1 + O(\exp[-\frac{T\pi^2}{2m_0}]) \right\}$ wurde hier verzichtet.

6.4. Berechnung des Integrals $\widehat{\Delta E}$

Wie zuvor führen $T \cdot O(x^6)$ sowie $T^2 \cdot O(x^8)$ auf dieselbe Ordnung $O\left(\frac{1}{T^{5/2}}\right)$. Für die neu hinzukommende Ordnung $O\left(\frac{1}{T^{7/2}}\right)$ kommen gar drei Quellen in Betracht: $T \cdot O(x^8)$ aus dem linearen Term, $T^2 \cdot O(x^{10})$ aus dem gemischt-quadratischen und $T^3 \cdot O(x^{12})$ aus dem kubischen Term. Die Substitution

$$y = \frac{T\pi^2}{2m_0} \cdot x^2$$

verschafft hierüber Klarheit:

$$\begin{aligned} \widehat{\Delta E} &= \exp(-T m_0) \cdot \frac{\sqrt{2m_0}}{\pi} \cdot \int_0^\infty dy \exp(-y) \frac{1}{\sqrt{y}} \cdot \\ &\quad \left\{ \frac{1}{\sqrt{T}} + \frac{1}{2m_0} \cdot y^2 \cdot \frac{1}{T^{3/2}} - \frac{1}{2m_0^2} \cdot y^3 \cdot \frac{1}{T^{5/2}} + \frac{1}{8m_0^2} \cdot y^4 \cdot \frac{1}{T^{5/2}} \right. \\ &\quad \left. + \frac{5}{8m_0^3} \cdot y^4 \cdot \frac{1}{T^{7/2}} - \frac{1}{4m_0^3} \cdot y^5 \cdot \frac{1}{T^{7/2}} + \frac{1}{48m_0^3} \cdot y^6 \cdot \frac{1}{T^{7/2}} + O\left(\frac{1}{T^{9/2}}\right) \right\}. \end{aligned}$$

Die verbleibenden Gammafunktionen (6.16) sind in Anhang E aufgeführt.

Nach dem Sortieren der Terme ergibt sich somit folgendes Endergebnis für $\widehat{\Delta E}$

$$\begin{aligned} \widehat{\Delta E} &= \exp(-T m_0) \left[\sqrt{\frac{2m_0}{\pi}} \cdot \frac{1}{\sqrt{T}} + \frac{3}{4\sqrt{2\pi m_0}} \cdot \frac{1}{T^{3/2}} \right. \\ &\quad \left. - \frac{15}{64\sqrt{2\pi} m_0^{3/2}} \cdot \frac{1}{T^{5/2}} + \frac{105}{512\sqrt{2\pi} m_0^{5/2}} \cdot \frac{1}{T^{7/2}} + O\left(\frac{1}{T^{9/2}}\right) \right], \quad (6.20) \end{aligned}$$

welches sich unter Beachtung der L - T -Vertauschung als *identisch zum früheren Resultat* (5.45) aus Abschnitt 5.3.9 herausstellt.

Somit wird ebenfalls die im Rahmen der Wurzelnäherung explizit berechnete Ordnung $O\left(\frac{1}{T^{7/2}}\right)$ bzw. $O\left(\frac{1}{L^{7/2}}\right)$ mittels beider Methoden gegenseitig bestätigt. Des Weiteren diente dies der Kontrolle der Berechnungen innerhalb dieses Kapitels. Denn erneut liefert die für $m_0 \ll 1$ gültige Wurzelnäherung innerhalb einer jeden Ordnung $O\left(\frac{1}{T^{n/2}}\right)$ lediglich den Term führender m_0 -Ordnung aus dem allgemeinen Ergebnisausdruck (6.17)-(6.19). Dies trifft übrigens auch für die einzelnen Quellterme zu, wenn eine Ordnung aus mehreren dieser zusammengesetzt wurde.

Die Grenzflächenspannung σ , um die Auflistung der Ergebnisse zu vervollständigen, bleibt übrigens identisch, da diese weder von L noch von T abhängt. Explizit erhält man die Grenzflächenspannung hier über die Differenz der reduzierten Freien Energien

$$\widehat{F}_{Grenz} = \widehat{F}_{-+} - \widehat{F}_{++} + \ln L,$$

welche um den Entropieterm $\ln L$ aufgrund der L Anordnungsmöglichkeiten einer Grenzfläche senkrecht zur x -Richtung ergänzt und auf die an der Grenzschicht beteiligten T Gitterpunkte bezogen wird:

$$\begin{aligned}\sigma &= \lim_{L \rightarrow \infty} \lim_{T \rightarrow \infty} \frac{\hat{F}_{\text{Grenz}}}{T} \\ &= \lim_{T \rightarrow \infty} \left(-\frac{1}{T} \ln \widehat{\Delta E} \right).\end{aligned}$$

Hierüber ergibt sich das aus 5.3.7 bekannte Resultat

$$\sigma = m_0 = 2|\beta - \tilde{\beta}|, \quad (6.21)$$

welches lediglich von der Temperatur abhängt.

6.5 Analytische Beziehungen zu $\Delta E = -L c_L$

Es ist bereits mehrfach darauf hingewiesen worden, daß sich die angewandten Verfahren zur Berechnung der Energieaufspaltung auf nicht-triviale Weise unterscheiden und dennoch im Ergebnis bestens bestätigen.

Es wäre daher interessant, eine Korrespondenz zwischen den Formelansätzen auf höherer Ebene als dem Endresultat zu finden.

Bei dem in Kapitel 5 angewandten Verfahren ergab sich die Energieaufspaltung ursprünglich aus einer Fourierreihenentwicklung $\Delta E = -L \sum_{j=0}^{\infty} c_{(2j+1) \cdot L}$, welche nach dem ersten Koeffizienten c_L abgebrochen werden konnte, da bereits der nächste c_{3L} deutlich schwächer war und lediglich eine exponentiell abfallende Korrektur hervorbrachte:

$$\Delta E = -L c_L \left[1 + O(\exp(-2Lm_0)) \right].$$

Dieser Korrekturterm wird im Folgenden nicht weiter beachtet; der Vergleich wird sich also auf das Integral $\Delta E = -L c_L$ beschränken.

Durch Konturverschiebung am Schlitz entlang fand sich hierfür folgender Integralausdruck über die Diskontinuität $\text{dis}_h(s)$

$$\Delta E = \int_{|z_1|}^{|z_3|} \text{dis}_h(s) \cdot \exp(-L\pi s) ds \quad \text{mit} \quad \begin{aligned}|z_1| &= \frac{m_0}{\pi} \\ |z_3| &= \frac{2(\beta + \tilde{\beta})}{\pi},\end{aligned}$$

wobei bereits benutzt wurde, daß die Diskontinuität reell ist. Mit $\text{dis}_h(s) = 2 \cdot \lim_{\eta \rightarrow 0} h(is + \eta)$ folgte weiter:

$$\Delta E = 2 \int_{|z_1|}^{|z_3|} \lim_{\eta \rightarrow 0} h(is + \eta) \cdot \exp(-L\pi s) ds.$$

In Kapitel 5 wurde nun zunächst das untere Schlitzende durch Substitution auf Null gesetzt, und anschließend die Diskontinuität ausgerechnet. Hier bietet sich zum besseren Vergleich der beiden Integralausdrücke die umgekehrte

Vorgehensweise an: Nach der in 5.3.4 vorgestellten Methode berechnet sich der Limes am rechten Schlitzufer zu

$$\begin{aligned} \lim_{\eta \rightarrow 0} h(is + \eta) &= \frac{\sinh(\pi s)}{\sqrt{\left[\cosh(m_0) + 1 - \cosh(\pi s) \right]^2 - 1}} \\ &= \frac{\sinh(\pi s)}{\sqrt{1 - \left[\cosh(m_0) + 1 - \cosh(\pi s) \right]^2}} ; \end{aligned} \quad (6.22)$$

für die letzte Umformung wird verwendet, daß aufgrund des Exponentialfaktors $\exp(-L\pi s)$ im Integranden nur kleine $s - |z_1| = s - \frac{m_0}{\pi}$ merklich zum Integral beitragen, was auch den Anlaß zur Sattelpunktsentwicklung in Abschnitt 5.3.5 gab und in deren Rahmen daher eine verträgliche Annahme darstellt (m_0 sei hierzu nicht übermäßig groß bzw. $s - \frac{m_0}{\pi} \ll 1$ sei entsprechend klein gewählt gegenüber dem als endlich vorausgesetzten m_0).

Als für den nachfolgenden Vergleich wichtiges Zwischenresultat ergibt sich damit

$$\Delta E = 2 \int_{|z_1|}^{|z_3|} \frac{\sinh(\pi s)}{\sqrt{1 - \left[\cosh(m_0) + 1 - \cosh(\pi s) \right]^2}} \cdot \exp(-L\pi s) ds . \quad (6.23)$$

Via Substitution $s = r + |z_1| = r + \frac{m_0}{\pi}$, die das untere Schlitzende auf Null setzt, erhält man den Ausdruck

$$\Delta E = \exp(-L m_0) \cdot \int_0^{|z_3|-|z_1|=a} \text{dis}_h^{(1)}(r) \cdot \exp(-L\pi r) dr \quad (6.24)$$

$$\text{mit } \text{dis}_h^{(1)}(r) = 2 \cdot \frac{\sinh(\pi r + m_0)}{\sqrt{1 - \left[\cosh(m_0) + 1 - \cosh(\pi r + m_0) \right]^2}} , \quad (6.25)$$

welcher nach hyperbolischer Umformung die aus 5.3.4 gewohnte Form aufweist:

$$\text{dis}_h^{(1)}(r) = \frac{\sinh(\pi r + m_0)}{\sqrt{\sinh(\frac{\pi r}{2} + m_0) \sinh(\frac{\pi r}{2}) [1 - \sinh(\frac{\pi r}{2} + m_0) \sinh(\frac{\pi r}{2})]}} . \quad (6.26)$$

Soweit zum Integral $\Delta E = -L c_L$.

Der andere Ausgangspunkt zur Berechnung der Energieaufspaltung, welcher in Kapitel 6 Anwendung fand, basierte auf dem Verhältnis der Zustandssummen $\frac{Z_{-+}}{Z_{++}}$ mit und ohne einer Grenzfläche senkrecht zur x -Richtung. Höhere Multikink-Konfigurationen, zu mehrfachen Grenzflächen gehörend, wurden hierbei in den Zustandssummen vernachlässigt. Dies bedeutete eine Einschränkung auf die niedrigsten 0- und 1-Fermion-Anregungen unter der Kenntnis, daß die höheren 2-, 4-, 6-, ... bzw. 3-, 5-, 7-, ... -Anregungsbeiträge nur exponentielle Korrekturen darstellen. Für eine große Anzahl an Freiheitsgraden wurde unter

diesen Annahmen das folgende Integral über die Konfigurationen normierter Ein-Fermion-Energien gefunden:

$$\widehat{\Delta E} = 2 \int_0^1 dx \exp[-|\varepsilon(x)| \cdot T].$$

Durch L - T -Vertauschung erhält man:

$$\Delta E = 2 \int_0^1 dx \exp[-|\varepsilon(x)| \cdot L].$$

Es soll nun eine analytische Beziehung zu dem Ausdruck $\Delta E = -L c_L$ hergestellt werden. Dies geschieht über die Substitution

$$y = \frac{|\varepsilon(x)|}{\pi}.$$

Mit $\frac{|\varepsilon(0)|}{\pi} = \frac{m_0}{\pi} = |z_1|$ und $\frac{|\varepsilon(1)|}{\pi} = \frac{2(\beta+\bar{\beta})}{\pi} = |z_3|$ folgt zunächst

$$\Delta E = 2 \int_{|z_1|}^{|z_3|} dy J(y) \exp(-L\pi y) \quad \text{mit } J(y) = \frac{\pi}{\frac{d}{dx}|\varepsilon(x)|}.$$

Mit etwas Geschick gelingt es, die Jacobiante durch y auszudrücken; unter Verwendung von $\cos(\pi x) = \cosh(m_0) + 1 - \cosh(|\varepsilon(x)|)$ folgt nämlich

$$\begin{aligned} \frac{d}{dx} |\varepsilon(x)| &= \frac{\pi \sin(\pi x)}{\sqrt{[\cosh(m_0) + 1 - \cos(\pi x)]^2 - 1}} \\ &= \pi \frac{\sqrt{1 - [\cosh(m_0) + 1 - \cosh(\pi y)]^2}}{\sinh(\pi y)}, \end{aligned}$$

und man erhält nach erfolgter Substitution den Integralausdruck

$$\Delta E = 2 \int_{|z_1|}^{|z_3|} \frac{\sinh(\pi y)}{\sqrt{1 - [\cosh(m_0) + 1 - \cosh(\pi y)]^2}} \cdot \exp(-L\pi y) dy. \quad (6.27)$$

Letzterer erweist sich nun als identisch zum Diskontinuitätsausdruck (6.23). Nach Umsetzung der Integrationsgrenzen und hyperbolischer Umformung erhält man selbstverständlich auch die anderen Formulierungen (6.24)-(6.26).

Es ist also in der Tat gelungen, auf analytischem Wege eine Brücke zwischen den verwendeten Verfahren zu schlagen:

$$\Delta E = -L c_L = \int_{-1}^{+1} dx \exp[-|\varepsilon(x)| \cdot L]. \quad (6.28)$$

6.5. Analytische Beziehungen zu $\Delta E = -L c_L$

Dieser interessante Zusammenhang bezieht sich hier wohlgemerkt auf die niedrigsten und damit dominierenden Beiträge in beiden Ansätzen. Speziell scheint der niedrigste Fourierkoeffizient c_L gerade der Mitnahme der niedrigsten Fermion-Anregungen zu entsprechen.

Diese Korrespondenz hilft, ein tieferes Verständnis für die Energieaufspaltung zu gewinnen:

Auf der einen Seite steht aus Kapitel 5 mit $\Delta E = -L c_L$ die Energiefülle, womit die Energieaufspaltung Privman und Fisher folgend grundlegend behandelt wird. Die Onsager-Kaufman-Lösung bietet hierfür einen ausreichenden Rahmen.

Auf der anderen Seite wird in Kapitel 6 der Zusammenhang der Energieaufspaltung mit Grenzflächen aufgegriffen. Dieser kann durch Hinzunahme der von Schultz, Mattis und Lieb erdachten fermionischen Lösungsmethode tiefgreifend aufgedeckt werden, wobei sich die Grenzflächen in dieser Beschreibung als angeregte Fermionen wiederfinden. In diesem Bild ergibt die Energieaufspaltung den rechts aufgeführten Integralausdruck über einzelne Fermionbeiträge.

Diese unterschiedlichen Ansichten wurden nun überzeugend ineinander überführt.

Weiterhin offen und interessant bleibt in diesem Zusammenhang noch, ob sich diese Korrespondenz auch zwischen höheren Fourierkoeffizienten (c_{3L}, c_{5L}, \dots) und höheren Fermion-Anregungen ($n = 3, n = 5, \dots$) wiederfinden lässt. Diese Fragestellung ist durchaus nicht-trivial, lässt sich allerdings im Rahmen der hier gemachten Approximationsansätze noch nicht beantworten. Insbesondere wäre hierzu eine Einbeziehung mehrfacher Grenzflächen-Konfigurationen notwendig. Ein möglicher Ansatzpunkt könnte dann auch in der Berücksichtigung höherer Beiträge als in (5.8) bzw. (6.9) liegen.

Kapitel 7

Resümee

Innerhalb dieser Arbeit wurde das zweidimensionale Ising-Modell aus den grundlegenden Modellannahmen heraus gründlich durchleuchtet. Ausgangspunkt der analytischen Betrachtungen waren die exakten Lösungsverfahren nach Onsager und Kaufman [15] sowie nach Schultz, Mattis und Lieb [17], die in Kapitel 2 und 4 jeweils ausführlich vorgestellt wurden. Ersteres basierte auf Spindarstellungen von Drehungen, wodurch das Problem auf die Diagonalisierung dieser zugeordneten Drehungen reduziert wurde. Letzteres verlagerte die Problemstellung auf Fermionoperatoren, die in eine Besetzungszahldarstellung diagonalisiert wurden. Zwischen diesen Lösungsverfahren wurden deutliche Parallelen herausgearbeitet, die zur Ergänzung in inhaltlichen Zusammenhängen beitrugen.

Besonderes Augenmerk galt hierbei der Energieaufspaltung $\Delta E = E_{0-} - E_{0+}$, welche die im endlichen Volumen ($L < \infty$) vorhandene Energilücke zwischen dem Grundzustand $|0+\rangle$ und dem ersten angeregten Zustand $|0-\rangle$ angibt. Diese Energieaufspaltung verschwindet im unendlichen Volumen $\lim_{L \rightarrow \infty} \Delta E = 0$ aufgrund einer eintretenden Entartung und ist somit ein wichtiger Indikator für das Auftreten einer spontanen Symmetriebrechung im Limes $L \rightarrow \infty$. Diese Arbeit befaßte sich im Speziellen damit, eine Formel für die Energieaufspaltung bei großen L zu finden, um diesen Limes näher zu begründen.

Erste Anhaltspunkte im Falle $L \gg 1$ ergaben sich aus einer geeigneten Definition der Grenzflächenspannung σ :

$$\Delta E \sim \exp(-L\sigma). \quad (7.1)$$

Ein verfolgter Ansatz zur genaueren Untersuchung betraf die Energilücke $\Delta E = E_{0-} - E_{0+}$ an sich. Um eine Aufhebung dieser Differenz im Falle großer L ($\lim_{L \rightarrow \infty} E_{0-} = \lim_{L \rightarrow \infty} E_{0+}$) zu verhindern, wurde Privman und Fisher [25] folgend der Gesamtausdruck ΔE nach Fourierkoeffizienten entwickelt. Unter diesen dominiert bereits der niedrigste Koeffizient c_L :

$$\Delta E = -L c_L \left[1 + O(\exp(-2Lm_0)) \right] \quad (7.2)$$

$$\text{mit } c_L = \int_{-1}^{+1} |\varepsilon(x)| \cos(L\pi x) dx, \quad (7.3)$$

$$\text{wobei } |\varepsilon(x)| = +\text{Arcosh}\{\cosh(m_0) + 1 - \cos(\pi x)\}. \quad (7.4)$$

Hierbei stellt

$$m_0 = 2 |\beta - \tilde{\beta}| \quad (7.5)$$

die zweifache Differenz zwischen der Temperaturvariablen $\beta = \frac{J}{k_B T}$ und ihrem dualen Pendant $\tilde{\beta}$ dar.

Die Berechnung des Integralausdrucks (7.3), welche von Privman und Fisher einst knapp skizziert worden war [25], wurde hier ausführlich vorgeführt, wobei zuweilen Alternativen aufgezeigt wurden. Dieses Kalkül erforderte einige Maßnahmen wie die Verschiebung des Integrationsweges in die komplexe Ebene entlang eines Schlitzes (Abb. 5.4) sowie eine anschließende Sattelpunktsentwicklung.

Als Resultat dieser Berechnungen ist der folgende Ausdruck für die Energieaufspaltung festzuhalten:

$$\begin{aligned} \Delta E = & \exp(-L m_0) \left[\sqrt{\frac{2 \sinh(m_0)}{\pi}} \cdot \frac{1}{\sqrt{L}} + a_1 \frac{1}{L^{3/2}} + a_2 \frac{1}{L^{5/2}} + \right. \\ & \left. + O\left(\frac{1}{L^{7/2}}\right) \right] \left[1 + O(\text{exponentielle Korrekturen}) \right] \end{aligned} \quad (7.6)$$

$$\text{mit } a_1 = \frac{1}{4\sqrt{2\pi}} \left(\sinh^{3/2}(m_0) + \frac{3 \cosh(m_0)}{\sqrt{\sinh(m_0)}} \right) \quad (7.7)$$

$$\begin{aligned} \text{und } a_2 = & \frac{1}{8\sqrt{2\pi}} \left(\frac{9}{8} \sinh^{5/2}(m_0) + \frac{15}{4} \cosh(m_0) \sqrt{\sinh(m_0)} + \right. \\ & \left. + 5 \sqrt{\sinh(m_0)} - \frac{15}{8} \frac{\cosh^2(m_0)}{\sinh^{3/2}(m_0)} \right). \end{aligned} \quad (7.8)$$

Hieran lässt sich nun ablesen, wie die Energieaufspaltung kontinuierlich mit wachsender Anzahl an Freiheitsgraden gegen Null geht.

Das Ergebnis in der Ordnung $O(\frac{1}{\sqrt{L}})$ stimmt mit demjenigen seitens Privman und Fisher [25] überein; darüber hinaus konnten hier noch die Ordnungen $O(\frac{1}{L^{3/2}})$ und $O(\frac{1}{L^{5/2}})$ explizit angegeben werden.

Eine interessante Näherung betraf die Funktion $|\varepsilon(x)|$, deren analytisches Verhalten für kleine Impulse in der Nähe des kritischen Punktes bedeutend simplifiziert werden konnte:

$$|\varepsilon(x)| \approx \sqrt{m_0^2 + \pi^2 x^2} \quad \text{für } x \ll 1, \beta \approx \beta_C. \quad (7.9)$$

Innerhalb dieser Näherung ließ sich das obige Ergebnis mit der Beschränkung $\beta \approx \beta_C \Rightarrow m_0 \ll 1$ korrekt reproduzieren, wobei hier sogar noch die Ordnung $O(\frac{1}{L^{7/2}})$ in expliziter Form angegeben werden konnte (Gl. (5.45)).

Für die Grenzflächenspannung σ ergab sich aus (7.6) das recht einfache Ergebnis, daß diese mit obigem m_0 übereinstimmt:

$$\sigma = m_0 = 2 |\beta - \tilde{\beta}|. \quad (7.10)$$

Dieses Ergebnis ist seit Onsager [9] bekannt.

Um die weitreichend berechneten höheren Ordnungen einer Bestätigung zu unterziehen, wurde in Kapitel 6 ein alternativer Formelausdruck für die Energieaufspaltung gesucht und gefunden. Dieser basierte auf dem Zusammenhang der Energieaufspaltung mit Grenzflächen und konnte mithilfe des zunächst entwickelten Konzepts der Fermion-Anregungen deutlich herausgestellt werden. Unter Einbeziehung der niedrigsten 0- und 1-Fermion-Anregungen gelang es, diesen in folgende alternative Formel umzumünzen:

$$\Delta E = \int_{-1}^{+1} dx \exp[-|\varepsilon(x)| \cdot L]. \quad (7.11)$$

(Die formale L - T -Vertauschung wurde hier bereits rückgängig gemacht.)

Auch dieses Integral wurde im Rahmen einer Sattelpunktsentwicklung berechnet und ergab eine glänzende Übereinstimmung der erzielten Resultate. Da sich die verwendeten Verfahren grundlegend unterscheiden, ist dies als wertvolle Bestätigung des Ergebnisses (7.6)-(7.8) anzusehen.

Abschließend wurde noch eine Korrespondenz zwischen den angewandten Verfahren aufgefunden; durch geschicktes Substituieren ließen sich die beiden Ansätze direkt ineinander überführen:

$$\Delta E = -L c_L = \int_{-1}^{+1} dx \exp[-|\varepsilon(x)| \cdot L]. \quad (7.12)$$

Die Mitnahme der Ein-Fermion-Anregungen entspricht also gerade der Einbeziehung des niedrigsten Fourierkoeffizienten c_L . Offen bleibt in diesem Zusammenhang noch, ob sich diese Korrespondenz in höheren Fermion-Anregungen und Fourierkoeffizienten wiederfindet.

Ich möchte daher mit den folgenden Worten von Itzykson und Drouffe [19] schließen:

„As suggested by the previous examples, numerous quantities can be analytically evaluated for the two-dimensional Ising-model, at the price of an ever increasing amount of mathematical sophistication.“

Anhang A

Grenzflächen im eindimensionalen Ising-Modell

Das eindimensionale Ising-Modell lässt sich im Gegensatz zu seinem zweidimensionalen Pendant sehr einfach abhandeln. Dennoch lassen sich bereits die algebraischen Grundzüge erkennen, was in dieser einfacheren Formulierung dem Verständnis hilft.

A.1 Beschreibung des eindimensionalen Ising-Modells

Das 1-D-Ising-Modell besteht aus einer linearen Kette von N lokalisierten Spins (Abb. A.1), für die die Grundannahmen aus Kapitel 2.1 gelten: Jeder Spin werde durch die klassische Spinvariable $s_i = \pm 1$ ($i = 1, \dots, N$) beschrieben, und zwischen nächsten Nachbarn bestehe eine homogene Wechselwirkung (der Zusatz „isotrop“ erübrigts sich in einer Dimension), die deren Parallelstellung energetisch bevorzuge. Letztere werde über eine positive Kopplungskonstante $J > 0$ vermittelt, die wie gewohnt in der inversen Temperaturvariablen

$$\beta = \frac{J}{k_B T} \quad (\text{A.1})$$

enthalten ist (siehe (2.6)). Die zusätzliche Kopplung mit einem äußeren Magnetfeld ließe sich in einer Dimension problemlos einbauen [45], wird hier aber nicht miteinbezogen, da diese in zwei Dimensionen ja bekanntlich nicht behandelt werden kann.

Für die Spins gelten zunächst periodische RB

$$s_{N+1} = s_1; \quad (\text{A.2})$$

die lineare Kette wird dadurch topologisch zu einem Ring geschlossen, wie in Abb. A.1 dargestellt wird.

Unter diesen Annahmen lauten die klassische Hamiltonfunktion

$$\mathcal{H} = - \sum_{i=1}^N s_i s_{i+1} \quad (\text{A.3})$$

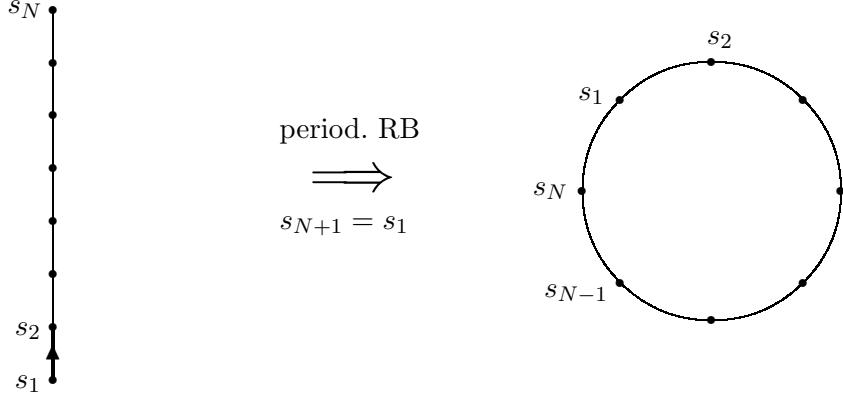


Abbildung A.1: 1-D-Ising-Modell

sowie die kanonische Zustandssumme:

$$\begin{aligned} Z_+ &= \sum_{s_1=\pm 1} \dots \sum_{s_N=\pm 1} \exp(-\beta \mathcal{H}) \\ &= \sum_{s_1=\pm 1} \dots \sum_{s_N=\pm 1} \left(\prod_{i=1}^N \exp(\beta s_i s_{i+1}) \right). \end{aligned} \quad (\text{A.4})$$

Durch die Einführung der Transfermatrix \mathcal{T} über deren Elemente

$$\langle s_i | \mathcal{T} | s_{i+1} \rangle = \exp(\beta s_i s_{i+1}) \quad (\text{A.5})$$

gelingt es, die Zustandssumme Z_+ (A.4) als Spur über deren N -fache Potenz darzustellen:

$$\begin{aligned} Z_+ &= \sum_{s_1=\pm 1} \dots \sum_{s_N=\pm 1} \langle s_1 | \mathcal{T} | s_2 \rangle \langle s_2 | \mathcal{T} | s_3 \rangle \dots \langle s_N | \mathcal{T} | s_{N+1} \rangle \\ &= \sum_{s_1=\pm 1} \langle s_1 | \mathcal{T}^N | s_1 \rangle \\ &= \text{Sp}(\mathcal{T}^N). \end{aligned} \quad (\text{A.6})$$

Dabei fanden die periodischen Randbedingungen (A.2) sowie die Vollständigkeit der Spinzustände Anwendung.

Die durch (A.6) beschriebene Propagation entlang der Kettenpunkte wird in Abb. A.1 durch einen „Transferpfeil“ angedeutet, wodurch sich auch die Namensgebung der Transfermatrix erklärt.

Die Transfermatrix \mathcal{T} lautet nach (A.5) ausgeschrieben:

$$\mathcal{T} = \begin{bmatrix} s_i = +1 & -1 & s_{i+1} = \\ \exp(+\beta) & \exp(-\beta) & +1 \\ \exp(-\beta) & \exp(+\beta) & -1 \end{bmatrix} \quad (\text{A.7})$$

Entsprechend den vier verschiedenen Anordnungsmöglichkeiten zweier benachbarter lokalisierter Spins handelt es sich um eine 2×2 -Matrix. An (A.7) lassen sich folgende Basiszustände für die Ising-Spins $s_i = \pm 1$ („up“ und „down“) ablesen [45]:

$$|s_i = +1\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}; \quad |s_i = -1\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}. \quad (\text{A.8})$$

Diese werden an einigen Stellen dieser Arbeit verwendet.

Da die Transfermatrix nach (A.7) und (A.5) symmetrisch ist, wird diese zur Spurberechnung in (A.6) mittels einer orthogonalen Transformation D in Diagonalgestalt gebracht; hierzu wird diese zunächst mit der Paulimatrix σ^x (2.20) umgeschrieben:

$$\mathcal{T} = \exp(+\beta) \mathbb{1} + \exp(-\beta) \sigma^x;$$

$$D \sigma^x D^{-1} = \sigma^z$$

$$\Rightarrow D \mathcal{T} D^{-1} = \exp(+\beta) \mathbb{1} + \exp(-\beta) \sigma^z = \begin{bmatrix} 2 \cosh(\beta) & 0 \\ 0 & 2 \sinh(\beta) \end{bmatrix}.$$

(Man vergleiche übrigens mit dem Darstellungswechsel (4.4) in Kapitel 4, der V_1 in Diagonalgestalt brachte; zum Zusammenhang zwischen V_1 und \mathcal{T} siehe A.5.)

Es ergeben sich also die beiden Eigenwerte der Transfermatrix

$$\lambda_+ = 2 \cosh(\beta), \quad \lambda_- = 2 \sinh(\beta), \quad (\text{A.9})$$

mit denen die Zustandssumme bei periodischen RB (A.6) lautet:

$$Z_+ = \lambda_+^N + \lambda_-^N. \quad (\text{A.10})$$

Für $\beta < \infty$ ($J < \infty$, $\tilde{T} > 0$) gilt

$$\lambda_+ > \lambda_-,$$

so daß im thermodynamischen Limes $N \rightarrow \infty$ nur der größere der beiden Eigenwerte eine Rolle spielt:

$$Z_+ = \lambda_+^N \left[1 + \left(\frac{\lambda_-}{\lambda_+} \right)^N \right] \xrightarrow{N \rightarrow \infty} \lambda_+^N.$$

Aus den nun leicht berechenbaren thermodynamischen Größen folgt, daß das Ising-Modell in einer Dimension keinen Phasenübergang aufweist [32, 45]; insbesondere gibt es keine spontane Magnetisierung. In zwei Dimensionen findet bekanntlich ein Phasenübergang statt [9, 33].

A.2 Antiperiodische RB durch Spinumkehr

Es werden nun antiperiodische RB

$$s_{N+1} = -s_1 \quad (\text{A.11})$$

und deren Auswirkungen auf die Zustandssumme untersucht.

In deren Formulierung im Transfermatrixformalismus

$$Z = \sum_{s_1=\pm 1} \dots \sum_{s_N=\pm 1} \langle s_1 | \mathcal{T} | s_2 \rangle \langle s_2 | \mathcal{T} | s_3 \rangle \dots \langle s_N | \mathcal{T} | s_{N+1} \rangle$$

werden die antiperiodischen RB (A.11) durch einen Spinumkehroperator A_{ap} im letzten Matrixelement berücksichtigt:

$$\langle s_N | \mathcal{T} | s_{N+1} \rangle = \langle s_N | \mathcal{T} A_{ap} | s_1 \rangle ;$$

hierzu klappt A_{ap} einen Spin um gemäß

$$A_{ap} | s_1 \rangle = | -s_1 \rangle . \quad (\text{A.12})$$

Die Zustandssumme Z_- bei antiperiodischen RB ergibt sich somit zu

$$Z_- = \text{Sp}(\mathcal{T}^N A_{ap}) . \quad (\text{A.13})$$

Die explizite Form des Spinumkehroperators A_{ap} (A.12) läßt sich folgendermaßen ermitteln: Gesucht ist eine Matrix, die die Spinzustände (A.8) ineinander überführt; nach kurzer Suche findet sich die Paulimatrix σ^x (2.20) mit dieser Eigenschaft:

$$\begin{aligned} \sigma^x | s_i = +1 \rangle &= \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = | s_i = -1 \rangle ; \\ \sigma^x | s_i = -1 \rangle &= \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = | s_i = +1 \rangle ; \\ \implies A_{ap} &= \sigma^x . \end{aligned} \quad (\text{A.14})$$

(Man vergleiche mit dem zweidimensionalen Fall: Dort tritt entsprechend den L Ising-Spins pro Zeile, die es umzuklappen gilt, ein L -faches direktes Produkt der Paulimatrix σ^x mit sich selber auf.)

Damit lautet Z_- (A.13):

$$Z_- = \text{Sp}(\mathcal{T}^N \sigma^x) . \quad (\text{A.15})$$

Da \mathcal{T} und σ^x kommutieren, kann deren Diagonalisierung simultan erfolgen.

$$\begin{aligned}
 Z_- &= \text{Sp} [D \mathcal{T}^N D^{-1} D \sigma^x D^{-1}] = \text{Sp} [D \mathcal{T}^N D^{-1} \sigma^z] \\
 &= \text{Sp} \left[\begin{pmatrix} \lambda_+^N & 0 \\ 0 & \lambda_-^N \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \right] \\
 \Rightarrow Z_- &= \lambda_+^N - \lambda_-^N. \tag{A.16}
 \end{aligned}$$

Der Unterschied zu Z_+ liegt also in dem Vorzeichen zwischen dem kleineren und größeren Eigenwert:

$$\frac{Z_-}{Z_+} = \frac{\lambda_+^N - \lambda_-^N}{\lambda_+^N + \lambda_-^N}. \tag{A.17}$$

Bei Betrachtung der Eigenvektoren in der Diagonaldarstellung fällt auf, daß der zum größeren Eigenwert λ_+ gehörige Eigenvektor $\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$ symmetrisch bezüglich der (diagonalisierten) Spinumkehr $D \sigma^x D^{-1} = \sigma^z$ ist

$$\sigma^z \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = + \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix},$$

während sich der zum kleineren Eigenwert λ_- gehörende Eigenvektor $\begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$ als antisymmetrisch herausstellt:

$$\sigma^z \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = - \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}.$$

Dadurch erklärt sich obiger Vorzeichenwechsel bei Einbau des Umkehroperators in die Spur.

Man vergleiche hierzu die Zustandssummen (3.21), (3.23) und deren Verhältnis im zweidimensionalen Fall.

A.3 Grenzfläche bei antiferromagnetischer Kopplung

Der soeben gefundene Zusammenhang kann noch auf andere Weise hergeleitet werden. Die Idee hierzu stammt von Onsager [9].

Grundlage ist eine *antiferromagnetische Kopplung*, die eine *antiparallele Spinausrichtung* („staggered magnetization“) bewirkt (Abb. A.2).

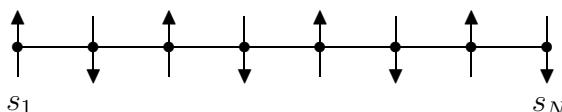


Abbildung A.2: Antiparallele Spinausrichtung für $J < 0$

Diese wird im Gegensatz zu vorher (A.1, ferromagnetischer Fall) durch eine negative Kopplungskonstante $J < 0$ beschrieben. Durch den Wechsel $J \rightarrow -J$ erhält man ein zusätzliches Minuszeichen in der Temperaturvariablen $\beta = \frac{J}{k_B T}$

$$\beta \rightarrow -\beta ,$$

wobei dann weiterhin $\beta > 0$ gilt.

Da die im ferro- und antiferromagnetischen Fall bevorzugten Spinausrichtungen (komplett parallel bzw. antiparallel) dieselbe klassische Energiekonfiguration ($\beta \mathcal{H}$ mit respektive $J \gtrless 0$) aufweisen, und dies auch für Abweichungen von der jeweiligen Idealordnung gilt, lassen sich die Ergebnisse des vorangehenden Abschnitts auf dieser Grundlage reproduzieren.

Bei gleichbleibender Hamiltonfunktion \mathcal{H} (A.3) lautet dann die Zustandssumme Z_{af} :

$$\begin{aligned} Z_{af} &= \sum_{s_1=\pm 1} \dots \sum_{s_N=\pm 1} \exp(+\beta \mathcal{H}) \\ &= \sum_{s_1=\pm 1} \dots \sum_{s_N=\pm 1} \left(\prod_{i=1}^N \exp(-\beta s_i s_{i+1}) \right). \end{aligned}$$

Mithilfe der Transfermatrixelemente

$$\langle s_i | \mathcal{T}_{af} | s_{i+1} \rangle = \exp(-\beta s_i s_{i+1}) \quad (\text{A.18})$$

erhält man bei periodischer Fortsetzung der Kette durch Ringschließung

$$s_{N+1} = s_1$$

die Zustandssumme der antiferromagnetischen Kette:

$$Z_{af} = \text{Sp} \left[(\mathcal{T}_{af})^N \right] = \left(\lambda_+^{af} \right)^N + \left(\lambda_-^{af} \right)^N. \quad (\text{A.19})$$

Die weiterhin symmetrische Transfermatrix \mathcal{T}_{af} unterscheidet sich nach (A.18) in den Vorzeichen von \mathcal{T} (A.7):

$$\begin{aligned} s_i &= +1 & -1 & s_{i+1} = \\ \mathcal{T}_{af} &= \begin{bmatrix} \exp(-\beta) & \exp(+\beta) \\ \exp(+\beta) & \exp(-\beta) \end{bmatrix} & +1 & = \exp(-\beta) \mathbb{1} + \exp(+\beta) \sigma^x. \end{aligned}$$

Durch Diagonalisierung mittels der Orthogonaltransformation $D \sigma^x D^{-1} = \sigma^z$ erhält man die Eigenwerte

$$\lambda_+^{af} = 2 \cosh(\beta), \quad \lambda_-^{af} = -2 \sinh(\beta). \quad (\text{A.20})$$

Offensichtlich ist der Eigenwert λ_-^{af} negativ.

Diese Eigenwerte lassen sich ($\beta \rightarrow -\beta$ entsprechend) auf diejenigen im ferromagnetischen Fall (A.9) zurückführen:

$$\lambda_+^{af} = \lambda_+, \quad \lambda_-^{af} = -\lambda_-. \quad (\text{A.21})$$

Die Frage, ob bei der periodischen Fortsetzung der Kette in Abb. A.2 eine Grenzfläche auftritt, die die antiparallele Spinausrichtung unterbricht (Onsager: „one misfit seam“), hängt davon ab, ob die Anzahl an Kettenpunkten gerade oder ungerade ist:

- $\mathbf{N = 2m} \quad (m \in \mathbb{N})$

Die Aneinanderreihung erfolgt ohne Störung der antiparallelen Ausrichtung, wie man sich an Abb. A.2 (dort $N = 8$) klarmachen kann.

Für die Zustandssumme ergibt sich nach (A.19) und (A.20):

$$\begin{aligned} Z_{af}^{(N=2m)} &= [2 \cosh(\beta)]^{2m} + [2 \sinh(\beta)]^{2m} \\ &\stackrel{(A.9)}{=} \lambda_+^N + \lambda_-^N. \end{aligned}$$

Dieses Ergebnis ist offensichtlich mit (A.10) identisch:

$$Z_{af}^{(N=2m)} = Z_+.$$

- $\mathbf{N = 2m + 1} \quad (m \in \mathbb{N})$

Bei der Aneinanderreihung tritt eine Grenzfläche auf, die die antiparallele Spinausrichtung unterbricht („one misfit seam“). Man verdeutlichte sich dies anhand von Abb. A.2, indem man die dort dargestellte Kette ($N = 8$) um einen Spin erweiterte.

$$\begin{aligned} Z_{af}^{(N=2m+1)} &= [2 \cosh(\beta)]^{2m+1} - [2 \sinh(\beta)]^{2m+1} \\ &\stackrel{(A.9)}{=} \lambda_+^N - \lambda_-^N. \end{aligned}$$

In diesem Fall erhält man dasselbe Ergebnis wie aus der antiperiodischen Zustandssumme (A.16):

$$Z_{af}^{(N=2m+1)} = Z_-.$$

Hier war allerdings kein Spinumkehroperator vonnöten.

Für das Verhältnis der Zustandssummen mit und ohne Grenzfläche erhält man also sowohl im ferro- als auch im antiferromagnetischen Fall

$$\frac{Z_{af}^{(N=2m+1)}}{Z_{af}^{(N=2m)}} = \frac{Z_-}{Z_+} = \frac{\lambda_+^N - \lambda_-^N}{\lambda_+^N + \lambda_-^N}.$$

Im Zuge solcher Überlegungen im zweidimensionalen Ising-Modell gelingt es Onsager, die Grenzflächenspannung in diesem zu bestimmen [9].

A.4 Fermionische Beschreibung des 1-D-Modells

Die fermionische Formulierung bot im zweidimensionalen Fall neue Aspekte auf, die das Verständnis für die Lösung förderten. Daher wird diese nun ebenfalls für das eindimensionale Modell vorgestellt, die sich mit vergleichbar geringem Aufwand realisieren lässt. Dabei werden sich einige bekannte Facetten wiederfinden. Wie zu erwarten, werden sich die beiden Eigenwerte direkt an einer Besetzungszahldarstellung ablesen lassen.

Hierzu wird die Transfermatrix \mathcal{T} (A.7) zunächst einer Umformung unterzogen, nach der sie eine deutliche Ähnlichkeit zu ihrem zweidimensionalen Pendant aufweist: Über die duale Temperaturvariable $\tanh \tilde{\beta} = \exp(-2\beta)$ ausgedrückt lautet diese

$$\mathcal{T} = \exp(+\beta) \mathbb{1} + \exp(-\beta) \sigma^x = \exp(+\beta) (\mathbb{1} + \tanh \tilde{\beta} \cdot \sigma^x);$$

wegen $(\sigma^x)^2 = \mathbb{1}$ gilt $\exp[\tilde{\beta} \sigma^x] = \cosh \tilde{\beta} (\mathbb{1} + \tanh \tilde{\beta} \cdot \sigma^x)$, so daß sie umgeschrieben werden kann zu

$$\mathcal{T} = \sqrt{2 \sinh(2\beta)} \cdot \exp[\tilde{\beta} \sigma^x]. \quad (\text{A.22})$$

Um (A.22) noch in eine geeignete Form für die fermionische Darstellung zu bringen, wird über die Ähnlichkeitstransformation (4.4)

$$\sigma^x \rightarrow S \sigma^x S^{-1} = -\sigma^z$$

ein Darstellungswechsel herbeigeführt, nach dem \mathcal{T} lautet:

$$\mathcal{T} = \sqrt{2 \sinh(2\beta)} \cdot \exp[-\tilde{\beta} \sigma^z]. \quad (\text{A.23})$$

In dieser Darstellung ist \mathcal{T} diagonal (vgl. [15]); man könnte bereits hier direkt die Eigenwerte

$$\begin{aligned} \sqrt{2 \sinh(2\beta)} \cdot \exp(+\tilde{\beta}) &= 2 \cosh(\beta) = \lambda_+ \\ \text{und } \sqrt{2 \sinh(2\beta)} \cdot \exp(-\tilde{\beta}) &= 2 \sinh(\beta) = \lambda_- \end{aligned}$$

ablesen. Der nächste Schritt, der auf die fermionische Darstellung führt, erscheint daher in einer Dimension eher aufgesetzt, zeigt aber interessante Parallelen auf.

Führt man die neuen Operatoren σ^+ und σ^- gemäß $\sigma^\pm = \frac{1}{2}(\sigma^x \pm i\sigma^y)$ ein, gilt

$$\sigma^z = 2(\sigma^+ \sigma^- - \frac{1}{2}),$$

und man erhält

$$\mathcal{T} = \sqrt{2 \sinh(2\beta)} \cdot \exp\left[-2\tilde{\beta}(\sigma^+ \sigma^- - \frac{1}{2})\right]. \quad (\text{A.24})$$

Wie bereits in Kapitel 4.1 festgestellt wurde, handelt es sich bei σ^+ und σ^- um Fermion-Erzeuger und -Vernichter. Da hier keine indizierten Größen auftreten,

gehorchen σ^+ und σ^- rein fermionischen Antikommatorrelationen

$$\{\sigma^+, \sigma^-\} = 1, \quad (\sigma^+)^2 = (\sigma^-)^2 = 0, \quad (\text{A.25})$$

und eine Jordan-Wigner-Transformation (siehe 4.1.2) ist nicht vonnöten. Dann ist offensichtlich

$$n_F = \sigma^+ \sigma^-$$

der Fermionzähler; angewandt auf einen Eigenzustand gibt er an, ob ein Fermion anwesend ist oder nicht,

$$n_F \in \{0, 1\},$$

und die Transfermatrix liegt in fermionischer Besetzungszahldarstellung vor:

$$\mathcal{T} = \sqrt{2 \sinh(2\beta)} \cdot \exp \left[-2 \tilde{\beta} \left(n_F - \frac{1}{2} \right) \right]. \quad (\text{A.26})$$

Hieran lassen sich mit $n_F \in \{0, 1\}$ die beiden Eigenwerte ablesen (vgl. oben):

$$\begin{aligned} n_F = 0 &\Rightarrow \lambda_+ = 2 \cosh(\beta); \\ n_F = 1 &\Rightarrow \lambda_- = 2 \sinh(\beta). \end{aligned}$$

Als Resultat für die Zustandssumme bei periodischen RB ergibt sich damit

$$Z_+ = \text{Sp}(\mathcal{T}^N) = \lambda_+^N + \lambda_-^N,$$

was mit dem bisherigen Ergebnis (A.10) übereinstimmt. Die Spur wurde hierzu über die Eigenzustände mit $n_F = 0$ und $n_F = 1$ ausgeführt.

Neben dieser Grundlösung tritt nun eine weitere Facette zutage: In der fermionischen Beschreibung kann der Einbau antiperiodischer RB um eine Variante erweitert werden. Hierzu beachte man, daß der Spinumkehroperator (A.14), der aufgrund des Darstellungswechsels $\sigma^x \rightarrow -\sigma^z$ nun das Aussehen $-\sigma^z$ aufweist, in die Form $(-1)^{n_F}$ gebracht werden kann:

$$\begin{aligned} (-1)^{n_F} &= \exp(i\pi n_F) = \exp(i\pi\sigma^+\sigma^-) = \exp(i\frac{\pi}{2}(\mathbb{1} + \sigma^z)) \\ &= i \exp(i\frac{\pi}{2}\sigma^z) \stackrel{(\sigma^z)^2 = \mathbb{1}}{=} -\sigma^z. \end{aligned}$$

Die Zustandssumme bei antiperiodischen RB (A.13) läßt sich dementsprechend folgendermaßen aufstellen:

$$Z_- = \text{Sp}[\mathcal{T}^N (-1)^{n_F}]. \quad (\text{A.27})$$

Über den Paritätsoperator $(-1)^{n_F}$ kann wie zuvor (vgl. A.2) nach symmetrischen und antisymmetrischen Eigenvektoren unterschieden werden:

$$\begin{aligned} n_F = 0 &\Rightarrow (-1)^{n_F} = +1 \Rightarrow \text{Eigenvektor zu } \lambda_+ \text{ ist symmetrisch;} \\ n_F = 1 &\Rightarrow (-1)^{n_F} = -1 \Rightarrow \text{Eigenvektor zu } \lambda_- \text{ ist antisymmetrisch.} \end{aligned}$$

Führt man nun die Spur über die Eigenzustände mit $n_F = 0$ und $n_F = 1$ aus, erhält man für die Zustandssumme bei antiperiodischen RB

$$\begin{aligned} Z_- &= \text{Sp} [\mathcal{T}^N (-1)^{n_F}] = \lambda_+^N \cdot (-1)^{n_F=0} + \lambda_-^N \cdot (-1)^{n_F=1} \\ &= \lambda_+^N - \lambda_-^N \end{aligned}$$

in Übereinstimmung mit dem früheren Ergebnis (A.16).

Wollte man die Zustandssummen Z_+ und Z_- wie in Kapitel 6 über ihre Fermion-Anregungen charakterisieren, ist dies nach der schon erfolgten Vorarbeit schnell getan. Hierzu müssen lediglich ein geeigneter Vakuumzustand und zugehöriger Anregungszustand definiert werden, was aber keinerlei Schwierigkeiten bereitet, da das Vakuum hier als naiver, kein Teilchen beherbergender Zustand aufgefaßt werden kann:

$$\begin{aligned} |0\rangle &\stackrel{\sim}{=} \text{Vakuum-Zustand, kein Fermion;} \\ |1\rangle &\stackrel{\sim}{=} \text{Anregungszustand, 1 Fermion;} \end{aligned}$$

oder kurz $|n_F\rangle$.

Damit gelingt folgende Charakterisierung:

$$Z_+ = \langle 0 | \mathcal{T}^N | 0 \rangle + \langle 1 | \mathcal{T}^N | 1 \rangle, \quad (\text{A.28})$$

$$Z_- = \langle 0 | \mathcal{T}^N | 0 \rangle - \langle 1 | \mathcal{T}^N | 1 \rangle. \quad (\text{A.29})$$

Für $N \gg 1$ liefert der Vakuumbeitrag in Form von λ_+^N deutlich stärkere Anteile, so daß er im thermodynamischen Limes $N \rightarrow \infty$ den einzigen Beitrag zu beiden Zustandssummen darstellt.

Man erkennt hieran ebenfalls, daß stets ein einzelner und eindeutiger Grundzustand existiert; so mußte nicht wie in der zweidimensionalen Notation zwischen dem Grundzustand bezüglich H^+ und demjenigen zu H^- unterschieden werden, deren Entartung im Limes unendlich vieler Freiheitsgrade aufgehoben wurde. Insofern tritt die behandelte Energieaufspaltung im eindimensionalen Ising-Modell nicht auf, aber eine spontane Symmetriebrechung war bei einem fehlenden Phasenübergang und dementsprechend nicht stattfindender Domänenbildung ja auch nicht zu erwarten.

Die fermionischen Zustandssummen Z^F , die auf der Berücksichtigung der Randbedingungen für Fermionen beruhen, lassen sich hier schnell abhandeln, da die eine Dimension folglich mit der Propagationsrichtung der Transfermatrix identisch ist. In dieser ist aber bereits als Folge der Grassmann-Algebra [21] auf die scheinbare Vertauschung periodischer und antiperiodischer RB gegenüber dem Spin-Fall hingewiesen worden. Somit wird in Z_+^F zusätzlich $(-1)^{n_F}$ in die Spur eingebaut, in Z_-^F hingegen nicht (siehe auch direkt in [21], Anhang C, S. 251),

und man erhält den recht einfachen Zusammenhang

$$Z_+^F = \text{Sp} [\mathcal{T}^N (-1)^{n_F}] = Z_- , \quad (\text{A.30})$$

$$Z_-^F = \text{Sp} [\mathcal{T}^N] = Z_+ . \quad (\text{A.31})$$

In zwei Dimensionen stellt sich der Zusammenhang zwischen den Fermion- und Spin-Zustandssummen etwas komplizierter dar: Dort wird eine Sektor-Spinzustandssumme jeweils aus der Summe bzw. Differenz aller vier fermionischen Sektorzustandssummen zusammengesetzt [19]. Dies liegt darin begründet, daß die (in einer Dimension nicht vorhandene) Randbedingung senkrecht zur Wanderungsrichtung der Transfermatrix recht unterschiedliche Auswirkungen auf Fermionen und Spins ausübt.

A.5 Übergang zu zwei Dimensionen

Dieser Abschnitt soll ein Gespür dafür vermitteln, welche Änderungen sich bei einer Erweiterung auf zwei Dimensionen ergeben.

Besonders augenfällig ist das Auftreten eines zweidimensionalen rechteckigen Gitters anstelle einer eindimensionalen Kette (Abb. A.3), so als hätte man pro Kettenpunkt eine ganze Zeile der Länge L in horizontaler Richtung eröffnet. Im Transfermatrixformalismus $Z = \text{Sp} [(Transfermatrix)^T]$ äußert sich dies in der Transfermatrix selber. Anstelle einer Transfermatrix \mathcal{T} (A.7), die ketten-gliedweise die eindimensionale Kette entlang wandert, erhält man eine Transfermatrix $\mathcal{P} = V_2 V'_1$, die nach unterschiedlichen Mechanismen in V'_1 und V_2 unterteilt werden kann: V'_1 ist für die vertikale Kopplung zwischen benachbarten Zeilen in Propagationsrichtung zuständig, und V_2 beschreibt die horizontale Kopplung innerhalb einer Zeile (siehe hierzu Abb. 2.2 und Abb. 2.3).

Während somit für V_2 kein Analogon in einer Dimension vorliegt, lassen sich V'_1 und \mathcal{T} , mit vergleichbaren Aufgaben vertraut, algebraisch ineinander überführen: Untersucht man nämlich die Matrixelemente (2.15) von V'_1

$$\langle s_1, \dots, s_L | V'_1 | s'_1, \dots, s'_L \rangle = \prod_{k=1}^L \exp [\beta s_k s'_k] ,$$

so fällt auf, daß V'_1 ein L -faches direktes Produkt (siehe (2.16)) von \mathcal{T} (A.5) mit sich selber ist [32]:

$$V'_1 = \mathcal{T} \times \mathcal{T} \times \dots \times \mathcal{T} . \quad (\text{A.32})$$

Verwendet man für \mathcal{T} die Darstellung (A.22)

$$\mathcal{T} = \sqrt{2 \sinh(2\beta)} \cdot \exp [\tilde{\beta} \sigma^x] ,$$

ergibt sich V'_1 nach den Rechenregeln des direkten Matrizenprodukts wie in (2.17) zu

$$V'_1 = [2 \sinh(2\beta)]^{\frac{L}{2}} \cdot \prod_{\alpha=1}^L \exp [\tilde{\beta} \sigma_{\alpha}^x] \quad (\text{A.33})$$

mit $\sigma_{\alpha}^x = \mathbb{1} \times \mathbb{1} \times \dots \times \sigma_{\alpha}^x \times \dots \times \mathbb{1}$.

\uparrow
α-te Stelle

Dies läßt sich insofern anschaulich verstehen, als daß anstelle eines einzelnen Punkt-zu-Punkt-Transfers dieser nun L mal stattfindet, nämlich für jede der L Spalten, und zwar unabhängig voneinander (Abb. A.3).

Für die Beschreibung solcher Vorgänge ist das direkte Produkt entsprechend seiner Definition (2.16) geradezu prädestiniert. Man vergleiche hierzu die Beschreibung von Mehrteilchensystemen in der Quantenmechanik.

Als Basiszustände für \mathcal{T} und damit für einen einzelnen Spin dienten in der oben gewählten Darstellung (siehe (A.8))

$$|s_i = +1\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \quad \text{und} \quad |s_i = -1\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}.$$

Diese lassen sich im zweidimensionalen Modell weiter verwenden unter Beachtung der Definition des direkten Matrizenproduktes: Hiernach werden die Elemente der L beteiligten 2×2 -Matrizen in (A.32) über diese zweikomponentige Basis berechnet. Etwas eleganter ist die Einführung eines entsprechend definierten tensoriellen Produkts der Vektoren [62]

$$|s_1\rangle \times |s_2\rangle \times \dots \times |s_L\rangle = |s_1, s_2, \dots, s_L\rangle,$$

die zudem verständlicher macht, wie der Zustand auf der rechten Seite zu lesen ist.

In zwei Dimensionen kommt noch die durch V_2 beschriebene horizontale Kopplung hinzu. In der oben gewählten Darstellung erhält man für diese [15, 32, 17]

$$V_2 = \prod_{\alpha=1}^L \exp [\beta \sigma_{\alpha}^z \sigma_{\alpha+1}^z]. \quad (\text{A.34})$$

Obigen Überlegungen entsprechend treten auch hier L -fache direkte Produkte auf, hier mit der Paulimatrix σ^z . Diese horizontale Kopplung läßt sich anschaulich an Abb. A.3 nachvollziehen, wenn man bedenkt, daß sich der Index α in σ_{α}^z auf den Spaltenplatz innerhalb einer Zeile bezieht. Im letzten Term ist die horizontale RB $\sigma_{L+1}^z = \pm \sigma_1^z$ (periodisch/antiperiodisch) zu berücksichtigen, die in zwei Dimensionen neu hinzukommt und anders behandelt werden muß als diejenige in Propagationsrichtung.

Die folgende Abbildung und Aufstellung sollen noch einmal die Änderungen verdeutlichen, die beim Übergang von einer zu zwei Dimensionen auftreten.

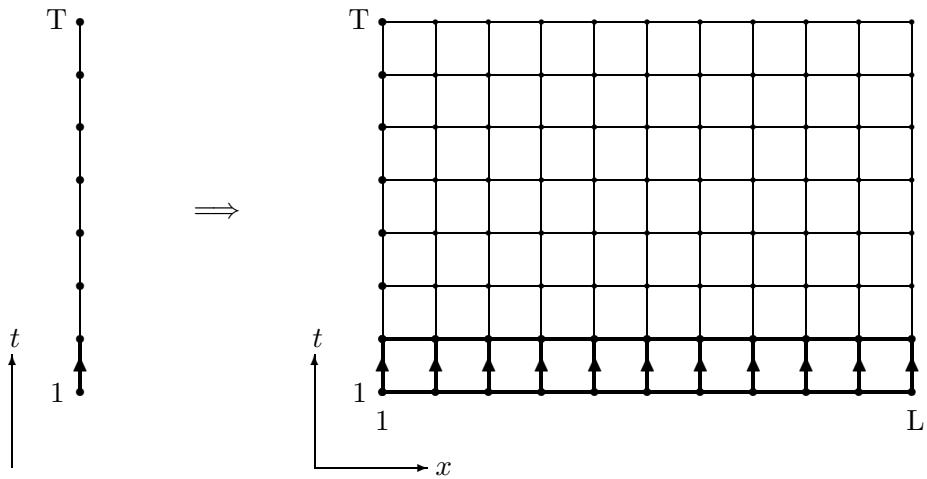


Abbildung A.3: Übergang zu zwei Dimensionen

D = 1

1 Spin auf Kettenpunkt $\implies L$ Spins pro Zeile

2 Einstellmöglichkeiten pro Spin $\implies 2^L$ Einstellmöglichkeiten pro Zeile

2×2 -Transfermatrix \mathcal{T} $\implies 2^L \times 2^L$ -Transfermatrix \mathcal{P}

\mathcal{T} : Kopplung in vertikaler
Kettenrichtung $\implies \mathcal{P} = V_2 V'_1$
 $V'_1 = \mathcal{T} \times \mathcal{T} \times \dots \times \mathcal{T}$:
Kopplung in vertikaler Richtung
 V_2 : Kopplung in horizontaler Richtung

einfache Paulimatrix σ^x \implies von Paulimatrizen σ_α^x , $\alpha = 1, \dots, L$:
 $\sigma_\alpha^x = \mathbb{1} \times \mathbb{1} \times \dots \times \sigma^x \times \dots \times \mathbb{1}$
 \uparrow
 α -te Stelle

$$\mathcal{T} = \sqrt{2 \sinh(2\beta)} \cdot \exp [\tilde{\beta} \sigma^x] \implies V'_1 = [2 \sinh(2\beta)]^{\frac{L}{2}} \cdot \prod_{\alpha=1}^L \exp [\tilde{\beta} \sigma_\alpha^x]$$

$$V_2 = \prod_{\alpha=1}^L \exp [\beta \sigma_\alpha^z \sigma_{\alpha+1}^z]$$

Auswirkungen periodischer RB auf Topologie:

$$\text{Kette} \rightarrow \text{Ring} \quad \Rightarrow \quad \text{flaches, rechteckiges Gitter} \rightarrow \text{Torus}.$$

Als prominentes Beispiel einer Größe beim Übergang von einer zu zwei Dimensionen sei noch einmal an den Spinumkehroperator erinnert:

$$\sigma^x \quad \Rightarrow \quad \sigma^x \times \sigma^x \times \dots \times \sigma^x = \sigma_1^x \cdot \sigma_2^x \cdot \dots \cdot \sigma_L^x.$$

Anstelle eines einzelnen Kettenpunktes müssen alle Spaltenplätze $\alpha = 1, \dots, L$ einer Zeile über σ_α^x angesprochen werden, ihren Spin umzuklappen. Hierzu dient das angegebene L -fache direkte Produkt.

In Zusammenhang mit den fermionischen Darstellungen im ein- (A.4) sowie zweidimensionalen Fall (Abschnitt 4.1) kann noch genauer auf die Frage nach der Anzahl an Dimensionen der zugehörigen Quantensysteme eingegangen werden. Wie in 2.2.10 erläutert wurde, ergibt sich aus dem Vergleich mit dem euklidischen Zeitentwicklungsoperator auf dem Gitter folgender Zusammenhang zwischen der Transfermatrix V und dem Hamiltonoperator H der Quantentheorie:

$$V = \exp[-H].$$

Im zweidimensionalen Ising-Modell wurde die Transfermatrix V aus Gründen der Zweckmäßigkeit ohne den Vorfaktor in \mathcal{P} (2.22) bzw. (A.33) definiert:

$$\mathcal{P} = [2 \sinh(2\beta)]^{\frac{L}{2}} \cdot V. \quad (\text{A.35})$$

Der zugehörige Hamiltonoperator wurde damit in 4.1.6, Gl. (4.60) gefunden zu

$$H = \sum_k \varepsilon_k \left(\xi_k^\dagger \xi_k - \frac{1}{2} \right).$$

Man erhält somit ein quantenmechanisches System in einer räumlichen Dimension. Bei Beschränkung auf gerade (4.47) bzw. ungerade (4.48) k -Werte erhält man genau L Fermionen, die angesichts der Form des Hamiltonoperators als frei bezeichnet werden können.

Im eindimensionalen Ising-Modell bietet es sich an, analog zu (A.35) ($\mathcal{P} = [2 \sinh(2\beta)]^{\frac{L}{2}} \cdot V^{(D=2)}$)

$$\mathcal{T} = \sqrt{2 \sinh(2\beta)} \cdot V^{(D=1)}$$

zu definieren (vgl. (A.32)). Damit ergibt sich nach (A.24) und $V = \exp[-H]$ folgender Hamiltonoperator:

$$H = 2\tilde{\beta} \left(\sigma^+ \sigma^- - \frac{1}{2} \right). \quad (\text{A.36})$$

Dieser beschreibt ein einzelnes Fermion. Das zugehörige quantenmechanische System besitzt also keine Raumdimension. Dies entspricht der Aussage in [63].

In beiden beschriebenen Modelldimensionen kommt noch eine Zeitentwicklung hinzu, die obigen Überlegungen entsprechend über $\exp[-Ht] = V^t$ bzw. mit $t = T$ über $\exp[-HT] = V^T$ vermittelt wird. In der Formulierung einer euklidischen Feldtheorie taucht diese als explizite Dimension auf. Das eindimensionale Ising-Modell weist also in einer quantentheoretischen Formulierung eine euklidische Raum-Zeit-Dimension auf, und das zweidimensionale Ising-Modell entsprechend zwei Raum-Zeit-Dimensionen.

Da in der klassischen statistischen Beschreibung die Zeitdimension als räumliche Propagationsrichtung der Transfermatrix erscheint (Darstellung I), wurde diese Raumrichtung in Abb. A.3 und allen anderen Abbildungen stets mit t gekennzeichnet, um den Bezug zur Zeitentwicklung herauszustellen.

1-D-Ising-Modell

$$H = 2\tilde{\beta} (\sigma^+ \sigma^- - \frac{1}{2})$$

1 Fermion

quantenmechanisches System
mit 0 Raum-Dimensionen

1 euklidische
Raum-Zeit-Dimension

2-D-Ising-Modell

$$H = \sum_k \varepsilon_k (\xi_k^\dagger \xi_k - \frac{1}{2})$$

L Fermionen

quantenmechanisches System
mit 1 Raum-Dimension

jeweils plus eine
Zeit-Dimension

2 euklidische
Raum-Zeit-Dimensionen

Diese Aufschlüsselung soll die in Abschnitt 2.2.10 angedeuteten Zusammenhänge verdeutlichen.

Anhang B

Identitäten am Einheitskreis

B.1 Beweis der Identität (5.15)

Bewiesen wird die Relation

$$\sum_{k=0}^{L-1} \exp \left\{ \pm i \pi n \frac{2k}{L} \right\} = \begin{cases} L & \text{für } n = sL, \\ 0 & \text{für } n \neq sL, \end{cases} \quad (\text{B.1})$$

mit $n, s \in \mathbb{Z}, L \geq 2 \in \mathbb{N}$.

Der Fall $L = 1$ führt auf die triviale Identität $1 = 1$ und wäre durch die obere Zeile abgedeckt. Er wird aus dem Beweis herausgenommen, um unnötigen Fallunterscheidungen vorzubeugen.

Für $n = 1$ enthält (B.1) die Aussage, daß die Summe über die verschiedenen L -ten Einheitswurzeln verschwindet [64], was sich geometrisch in der Polardarstellung veranschaulichen läßt [57]. Eine derartige Veranschaulichung von (B.1) bei Potenzierung der Einheitswurzeln mit $n \neq 1$ ist ebenfalls möglich, soll aber durch den folgenden algebraischen Beweis untermauert werden.

Nach der Moivreschen Formel gilt:

$$\sum_{k=0}^{L-1} \exp \left\{ \pm i \pi n \frac{2k}{L} \right\} = \sum_{k=0}^{L-1} \left[\cos \left(\frac{2\pi}{L} nk \right) \pm i \sin \left(\frac{2\pi}{L} nk \right) \right].$$

Da (B.1) für Real- und Imaginärteil gelten muß, verbleibt zu zeigen:

$$\sum_{k=0}^{L-1} \sin \left(\frac{2\pi}{L} nk \right) = 0, \quad (\text{B.2})$$

$$\sum_{k=0}^{L-1} \cos \left(\frac{2\pi}{L} nk \right) = \begin{cases} L & \text{für } n = sL, \\ 0 & \text{für } n \neq sL; \end{cases} \quad (\text{B.3})$$

für $n, s \in \mathbb{Z}, L \geq 2 \in \mathbb{N}$.

- Beweis der Sinusrelation (B.2)

Dem Gradstein/Ryshik [58] (Teil I, 1.341 Nr. 1, S. 57) ist folgende Identität zu entnehmen:

$$\sum_{k=0}^{L-1} \sin(x + ky) = \frac{\sin(x + \frac{L-1}{2}y) \sin(\frac{L}{2}y)}{\sin(\frac{1}{2}y)}.$$

Für $x = 0$ und $y = \frac{2\pi}{L}n$ folgt

$$\sum_{k=0}^{L-1} \sin\left(\frac{2\pi}{L}nk\right) = \frac{\sin\left(\frac{L-1}{L}n\pi\right) \sin(n\pi)}{\sin\left(\frac{n\pi}{L}\right)}.$$

1. Für $n = sL$ ergibt jeder Sinusterm auf der linken Seite bereits Null und damit die Summe die gewünschte Null; für die rechte Seite erhält man im Limes $n \rightarrow sL$ nach der Regel von l'Hospital durch Differenzieren nach n ebenfalls Null.
2. Für $n \neq sL$ ist bei endlichem L stets $\sin(\frac{n\pi}{L}) \neq 0$, so daß die rechte Seite Null ergibt.

Im Falle $L \rightarrow \infty$ erhält man nach l'Hospital ebenso Null.

- Beweis der Kosinusrelation (B.3)

Ebenfalls aus [58] (Teil I, 1.341 Nr. 3, S. 58) stammt die Identität

$$\sum_{k=0}^{L-1} \cos(x + ky) = \frac{\cos(x + \frac{L-1}{2}y) \sin(\frac{L}{2}y)}{\sin(\frac{1}{2}y)},$$

die für $x = 0$ und $y = \frac{2\pi}{L}n$ lautet:

$$\sum_{k=0}^{L-1} \cos\left(\frac{2\pi}{L}nk\right) = \frac{\cos\left(\frac{L-1}{L}n\pi\right) \sin(n\pi)}{\sin\left(\frac{n\pi}{L}\right)}.$$

1. Für $n = sL$ ist jeder Kosinusterm auf der linken Seite 1 und die Summe über L dieser Kosinusterme ergibt L ; für die rechte Seite erhält man ebenfalls L , indem man für $n \rightarrow sL$ gemäß der Regel von l'Hospital nach n differenziert.
2. Für $n \neq sL$ gilt bei endlichem L stets $\sin(\frac{n\pi}{L}) \neq 0$, so daß die rechte Seite Null wird.

Der Fall $L \rightarrow \infty$ ergibt nach l'Hospital ebenfalls Null.

B.2 Weitere Relationen

Bewiesen wird die Identität

$$\sum_{\substack{r_1, r_2, \dots, r_m=0 \\ \text{jeweils paarweise} \\ \text{verschieden}}}^{T-1} \exp\left(-\frac{2\pi i r_1}{T}\right) \cdot \exp\left(-\frac{2\pi i r_2}{T}\right) \cdot \dots \cdot \exp\left(-\frac{2\pi i r_m}{T}\right) = 0 \quad (\text{B.4})$$

für $T \geq m + 1$.

Der Fall $m = 1$ entspricht der Tatsache, daß die Summe der Einheitswurzeln verschwindet [64] und wurde bereits in Abschnitt B.1 bewiesen (Gl. (B.1) für $n = 1$):

$$\sum_{r=0}^{T-1} \exp\left(-\frac{2\pi i r}{T}\right) = 0 \quad \text{für } T \geq 2. \quad (\text{B.5})$$

(Für $T = 1$ ist diese Aussage nicht gültig.)

Aus (B.5) folgt:

$$\begin{aligned} & \left(\sum_{r=0}^{T-1} \exp\left(-\frac{2\pi i r}{T}\right) \right)^m = 0 \\ \Leftrightarrow & \sum_{\substack{r_1, r_2, \dots, r_m=0}}^{T-1} \exp\left(-\frac{2\pi i r_1}{T}\right) \cdot \exp\left(-\frac{2\pi i r_2}{T}\right) \cdot \dots \cdot \exp\left(-\frac{2\pi i r_m}{T}\right) = 0 \\ \Leftrightarrow & \sum_{\substack{r_1, r_2, \dots, r_m=0 \\ \text{jeweils paarweise} \\ \text{verschieden}}}^{T-1} \exp\left(-\frac{2\pi i r_1}{T}\right) \cdot \exp\left(-\frac{2\pi i r_2}{T}\right) \cdot \dots \cdot \exp\left(-\frac{2\pi i r_m}{T}\right) \\ & + \sum_{\substack{r_1, r_2, \dots, r_m=0 \\ \text{mind. 2 Indizes} \\ \text{gleich}}}^{T-1} \exp\left(-\frac{2\pi i r_1}{T}\right) \cdot \exp\left(-\frac{2\pi i r_2}{T}\right) \cdot \dots \cdot \exp\left(-\frac{2\pi i r_m}{T}\right) = 0. \end{aligned}$$

Der Beweis von (B.4) reduziert sich damit auf den Beweis der Relation

$$\sum_{\substack{r_1, r_2, \dots, r_m=0 \\ \text{mind. 2 Indizes} \\ \text{gleich}}}^{T-1} \exp\left(-\frac{2\pi i r_1}{T}\right) \cdot \exp\left(-\frac{2\pi i r_2}{T}\right) \cdot \dots \cdot \exp\left(-\frac{2\pi i r_m}{T}\right) = 0. \quad (\text{B.6})$$

Diese wird bewiesen für genau l gleiche Indizes ($2 \leq l \leq m$), die oBdA mit $1, 2, \dots, l$ durchnumeriert werden:

$$\begin{aligned} & \sum_{\substack{r_1, r_2, \dots, r_m=0}}^{T-1} \exp\left(-\frac{2\pi i r_1}{T}\right) \cdot \exp\left(-\frac{2\pi i r_2}{T}\right) \cdot \dots \cdot \exp\left(-\frac{2\pi i r_m}{T}\right) = \\ & \text{mit } r_1=r_2=\dots=r_l, \\ & \{r_l, \dots, r_m\} \text{ paarweise verschieden} \end{aligned}$$

$$= \sum_{r=0}^{T-1} \left(\exp\left(-\frac{2\pi i r}{T}\right) \right)^l \sum_{\substack{r_{l+1}, r_{l+2}, \dots, r_m=0 \\ \text{jeweils paarweise} \\ \text{verschieden}}}^{T-1} \exp\left(-\frac{2\pi i r_{l+1}}{T}\right) \cdot \dots \cdot \exp\left(-\frac{2\pi i r_m}{T}\right);$$

aufgrund der Voraussetzungen $m \geq l \geq 2$ und $T \geq m + 1$ gilt $T \geq l + 1 > 0$ und somit stets $l \neq sT$ ($s \in \mathbb{Z}$), weswegen nach (B.1)

$$\sum_{r=0}^{T-1} \left(\exp\left(-\frac{2\pi i r}{T}\right) \right)^l = \sum_{r=0}^{T-1} \exp\left\{-i\pi l \frac{2r}{T}\right\} = 0$$

folgt. Damit gelten auch (B.6) und (B.4).

B.3 Beweis von (4.102) und (4.103)

Dieser Abschnitt hat seinen Ursprung in [50].

Zum Beweis der in Abschnitt 4.5.1 benötigten Identität (4.102) wird zunächst folgende Relation bewiesen:

$$\prod_{\substack{l \\ \text{gerade}}}^{2T-1} \sinh\left(\frac{\varepsilon}{2} \pm i \frac{q_l}{2}\right) = 2^{-(T-1)} (\pm i)^T (\mp i) \sinh\left(T \frac{\varepsilon}{2}\right) \quad (\text{B.7})$$

mit $q_l = \frac{\pi l}{T}$, $l = 0, 1, 2, \dots, 2T - 1$.

Hierzu werden die in

$$\prod_{\substack{l \\ \text{gerade}}}^{2T-1} \sinh\left(\frac{\varepsilon}{2} \pm i \frac{q_l}{2}\right) = \frac{1}{2^T} \prod_{r=0}^{T-1} \left(\exp\left(+\frac{\varepsilon}{2} \pm i \frac{\pi r}{T}\right) - \exp\left(-\frac{\varepsilon}{2} \mp i \frac{\pi r}{T}\right) \right)$$

auftretenden Terme nach Potenzen von $\exp\left(\frac{\varepsilon}{2}\right)$ geordnet.

In höchster $\left(\exp\left(T \frac{\varepsilon}{2}\right)\right)$ und niedrigster $\left(\exp\left(-T \frac{\varepsilon}{2}\right)\right)$ Ordnung treten auf:

$$\begin{aligned} \prod_{\substack{l \\ \text{gerade}}}^{2T-1} \sinh\left(\frac{\varepsilon}{2} \pm i \frac{q_l}{2}\right) &= \frac{1}{2^T} \left[\exp\left(T \frac{\varepsilon}{2}\right) \cdot \exp\left(\pm i\pi \sum_{r=0}^{T-1} \frac{r}{T}\right) \right. \\ &\quad \left. {}_{T \text{ gerade}}^{\pm} \exp\left(-T \frac{\varepsilon}{2}\right) \cdot \exp\left(\mp i\pi \sum_{r=0}^{T-1} \frac{r}{T}\right) \right. \\ &\quad \left. + \text{ andere Ordnungen } \right]. \quad (\text{B.8}) \end{aligned}$$

$$\text{Mit } \sum_{r=0}^{T-1} \frac{r}{T} = \frac{T-1}{2}$$

$$\text{und } \exp\left(\mp i\pi \frac{T-1}{2}\right) = {}_{T \text{ ungerade}}^{\mp} \exp\left(\pm i\pi \frac{T-1}{2}\right) = {}_{T \text{ ungerade}}^{\mp} (\pm i)^T (\mp i)$$

folgt:

$$\prod_{\substack{l \\ \text{gerade}}}^{2T-1} \sinh \left(\frac{\varepsilon}{2} \pm i \frac{q_l}{2} \right) = 2^{-(T-1)} (\pm i)^T (\mp i) \sinh \left(T \frac{\varepsilon}{2} \right) + + \text{andere Ordnungen.} \quad (\text{B.9})$$

Um (B.7) zu beweisen, verbleibt somit zu zeigen, daß alle anderen Ordnungen in (B.9) bzw. (B.8) verschwinden.

Für $T = 1$ treten diese weiteren Ordnungen nicht auf. Ab $T \geq 2$ gibt es außer den in (B.8) angegebenen Ausdrücken Terme $O(\exp(\pm(T-2)\frac{\varepsilon}{2}))$ der Form

$$\begin{aligned} & \exp \left(\pm(T-2) \frac{\varepsilon}{2} \right) \cdot \left[\exp \left(\pm i\pi (-0 + \frac{1}{T} + \dots + \frac{T-1}{T}) \right) \right] \\ & + \exp \left(\pm(T-2) \frac{\varepsilon}{2} \right) \cdot \left[\exp \left(\pm i\pi (+0 - \frac{1}{T} + \dots + \frac{T-1}{T}) \right) \right] \\ & \vdots \\ & + \exp \left(\pm(T-2) \frac{\varepsilon}{2} \right) \cdot \left[\exp \left(\pm i\pi (+0 + \frac{1}{T} + \dots - \frac{T-1}{T}) \right) \right] \\ & = \exp \left(\pm(T-2) \frac{\varepsilon}{2} \right) \cdot \exp \left(\pm i\pi \sum_{r=0}^{T-1} \frac{r}{T} \right) \cdot \\ & \quad \cdot \left[\exp \left(\mp \frac{2\pi i}{T} \cdot 0 \right) + \exp \left(\mp \frac{2\pi i}{T} \cdot 1 \right) + \dots + \exp \left(\mp \frac{2\pi i}{T} \cdot (T-1) \right) \right] \\ & = \exp \left(\pm(T-2) \frac{\varepsilon}{2} \right) \cdot \exp \left(\pm i\pi \sum_{r=0}^{T-1} \frac{r}{T} \right) \cdot \sum_{r=0}^{T-1} \exp \left(\mp \frac{2\pi i}{T} \cdot r \right) \\ & = 0; \end{aligned} \quad (\text{B.10})$$

diese ergeben Null, da nach (B.5) bzw. (B.1)

$$\sum_{r=0}^{T-1} \exp \left(\mp \frac{2\pi i}{T} \cdot r \right) = 0$$

für $T \geq 2$ gilt.

Im Allgemeinen treten ab $T \geq m+1$ neue Terme auf, die aufgrund mehrerer Minuszeichen im Exponenten von (B.10) den Faktor

$$\sum_{\substack{r_1, r_2, \dots, r_m=0 \\ \text{jeweils paarweise} \\ \text{verschieden}}}^{T-1} \exp \left(-\frac{2\pi i r_1}{T} \right) \cdot \exp \left(-\frac{2\pi i r_2}{T} \right) \cdot \dots \cdot \exp \left(-\frac{2\pi i r_m}{T} \right) = 0$$

enthalten, der nach (B.4) für $T \geq m+1$ Null ergibt; die Indizes müssen paarweise verschieden sein, da die Minuszeichen vor verschiedenen Summanden im Exponenten (vgl. (B.10)) auftreten.

Die in (B.9) genannten anderen Ordnungen verschwinden somit allesamt, und (B.7) ist bewiesen.

Mithilfe der Umformung

$$\cosh(\varepsilon) - \cos(q_l) = 2 \sinh\left(\frac{\varepsilon}{2} + i \frac{q_l}{2}\right) \cdot \sinh\left(\frac{\varepsilon}{2} - i \frac{q_l}{2}\right) \quad (\text{B.11})$$

folgt unter Verwendung von (B.7) die zu beweisende Identität (4.102):

$$\prod_{\substack{l \\ \text{gerade}}}^{2T-1} \left\{ \cosh(\varepsilon) - \cos(q_l) \right\} = 2^{-(T-2)} \sinh^2\left(T \frac{\varepsilon}{2}\right).$$

Zum Beweis der Relation (4.103) wird analog zu (B.7) bewiesen:

$$\prod_{\substack{l \\ \text{ungerade}}}^{2T-1} \sinh\left(\frac{\varepsilon}{2} \pm i \frac{q_l}{2}\right) = 2^{-(T-1)} (\pm i)^T \cosh\left(T \frac{\varepsilon}{2}\right). \quad (\text{B.12})$$

Daraus folgt mit (B.11) die Identität (4.103)

$$\prod_{\substack{l \\ \text{ungerade}}}^{2T-1} \left\{ \cosh(\varepsilon) - \cos(q_l) \right\} = 2^{-(T-2)} \cosh^2\left(T \frac{\varepsilon}{2}\right).$$

Die in Abschnitt 4.5.2 benötigten Identitäten (4.109) und (4.110) finden sich völlig analog.

Anhang C

Verzweigungspunkte und Schlitze

$h(z)$ aus (5.21) mit $z \in \mathbb{C}$ enthält einen Wurzelausdruck der Form

$$\sqrt{w(z)^2 - 1}$$

$$\text{mit } w(z) = \cosh(m_0) + 1 - \cos(\pi z). \quad (\text{C.1})$$

Für $\sqrt{w(z)^2 - 1}$ (ein beliebiges Standardbeispiel) liegen die Verzweigungspunkte bei $w = \pm 1$; der Schlitz in der w -Ebene kann (wahlweise) wie in Abb. C.1 gelegt werden [57].

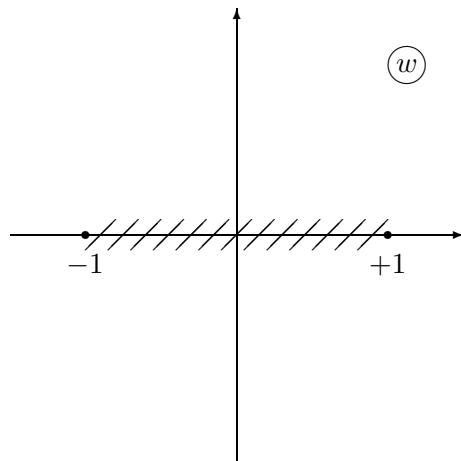


Abbildung C.1: Schlite und Verzweigungspunkte von $h(z)$ in der w -Ebene

Aus $w(z) = \pm 1$ lassen sich mit (C.1) die Verzweigungspunkte in der z -Ebene berechnen:

$$\begin{aligned}
 w(z) = +1 &\Leftrightarrow \cosh(m_0) + 1 - \cos(\pi z) = +1 \\
 &\Leftrightarrow \cosh(m_0) = \cosh(i\pi z) \\
 &\Leftrightarrow z_1 = +i \frac{m_0}{\pi}, \quad z_2 = -i \frac{m_0}{\pi}; \\
 w(z) = -1 &\Leftrightarrow \cosh(m_0) + 1 - \cos(\pi z) = -1 \\
 &\Leftrightarrow \cosh[2(\beta + \tilde{\beta})] - 1 - \cos(\pi z) = -1 \\
 &\Leftrightarrow \cosh[2(\beta + \tilde{\beta})] = \cosh(i\pi z) \\
 &\Leftrightarrow z_3 = +i \frac{2(\beta + \tilde{\beta})}{\pi}, \quad z_4 = -i \frac{2(\beta + \tilde{\beta})}{\pi}; \\
 \text{dabei ist } &|z_{1/2}| \leq |z_{3/4}|.
 \end{aligned}$$

Die Lage des Schlitzes in der z -Ebene erschließt sich aus dem Verhalten der Funktion $w(z)$ in der Nähe der Verzweigungspunkte z_1-z_4 ; zu diesem Zweck wird $w(z)$ um diese mit kleinem $\tau > 0$ nach Taylor entwickelt:

$$w(z_1 \pm i\tau) = +1 \mp \pi \sinh(m_0) \cdot \tau + O(\tau^2), \quad (\text{C.2})$$

$$w(z_2 \pm i\tau) = +1 \pm \pi \sinh(m_0) \cdot \tau + O(\tau^2), \quad (\text{C.3})$$

$$w(z_3 \pm i\tau) = -1 \mp \pi \sinh[2(\beta + \tilde{\beta})] \cdot \tau + O(\tau^2), \quad (\text{C.4})$$

$$w(z_4 \pm i\tau) = -1 \pm \pi \sinh[2(\beta + \tilde{\beta})] \cdot \tau + O(\tau^2). \quad (\text{C.5})$$

Darüber hinaus ist

$$w(iy) = \cosh(m_0) + 1 - \cosh(\pi y). \quad (\text{C.6})$$

Verfolgt man nun die in Abb. C.2 gezeigten Wege ①–④ und ⑤–⑧ entlang der imaginären Achse in der z -Ebene, so entsprechen sie in der w -Ebene nach (C.2)–(C.6) den in Abb. C.3 eingezeichneten auf der reellen Achse.

Aus der bekannten Lage der Schlitze in der w -Ebene kann auf diese Weise auf deren Lage in der z -Ebene geschlossen werden; sie sind in Abb. C.2 bzw. im Haupttext in Abb. 5.3 eingezeichnet.

Für die Funktion $\ln[w(z) + \sqrt{w^2(z) - 1}]$ kommt noch aufgrund des Logarithmus ein Verzweigungspunkt im Unendlichen der w -Ebene hinzu [57] (Null ist hier kein Verzweigungspunkt, da das Argument nie Null werden kann). Daraus reicht bei entsprechender Wahl der Schlitz in der w -Ebene zusätzlich bis nach $-\infty$ und gemäß obigen Überlegungen dementsprechend in der z -Ebene bis nach $+i\infty$ in der oberen Halbebene und nach $-i\infty$ in der unteren.

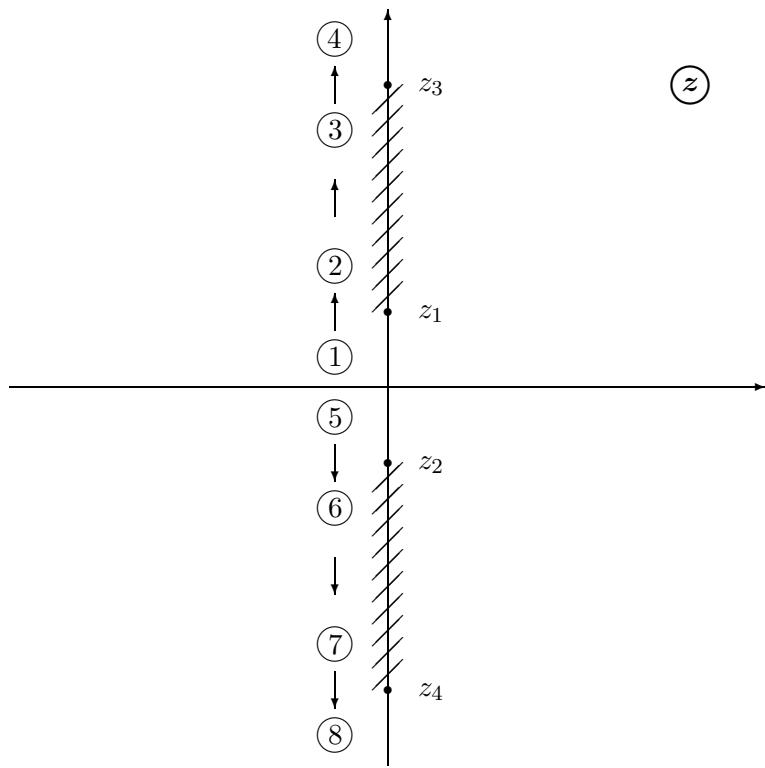


Abbildung C.2: Bewegung auf imaginärer Achse in der z -Ebene

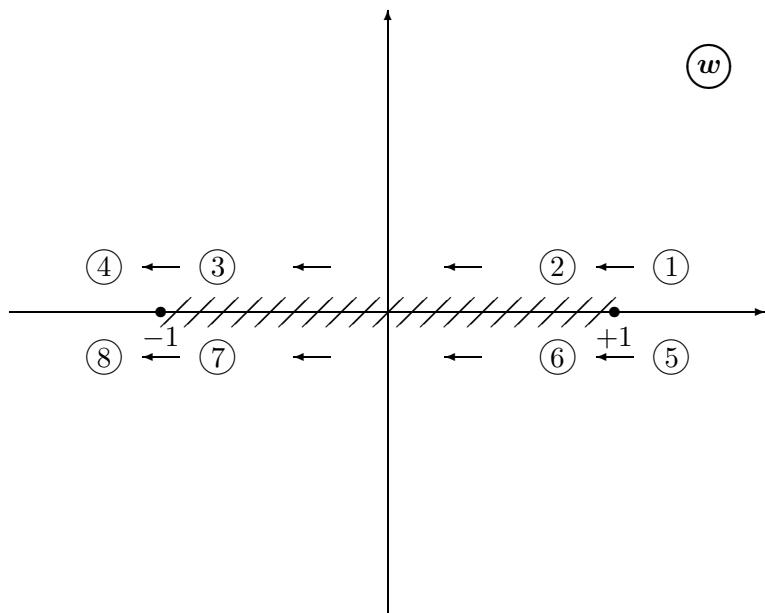


Abbildung C.3: Bewegung auf reeller Achse in der w -Ebene

Anhang D

Parametrisierungsschema

Die komplexen Kurvenintegrale

$$J_i = \int_{\Gamma_i} h(z) \exp(iL\pi z) dz$$

aus Abb. 5.4, die hier zur Verdeutlichung noch einmal als Abb. D.1 aufgeführt ist, lauten in geeigneter Parametrisierung:

$$\begin{aligned} J_1 &= I = \int_{-1}^{+1} h(s_1) \exp(iL\pi s_1) ds_1, \\ J_2 &= \int_0^d h(is_2 - 1) \exp(-L\pi s_2) \exp(-iL\pi) i ds_2, \\ J_3 &= \int_{-1}^{-\eta} h(id + s_3) \exp(iL\pi s_3) \exp(-L\pi d) ds_3, \\ J_4 &= \int_d^{m_0/\pi} h(is_4 - \eta) \exp(-L\pi s_4) \exp(-iL\pi\eta) i ds_4, \\ J_5 &= \int_{m_0/\pi}^d h(is_5 + \eta) \exp(-L\pi s_5) \exp(+iL\pi\eta) i ds_5, \\ J_6 &= \int_{+\eta}^{+1} h(id + s_6) \exp(iL\pi s_6) \exp(-L\pi d) ds_6, \\ J_7 &= \int_d^0 h(is_7 + 1) \exp(-L\pi s_7) \exp(+iL\pi) i ds_7. \end{aligned}$$

Der Hilfsweg $\tilde{\Gamma}$ verschwindet im Limes $\eta \rightarrow 0$.

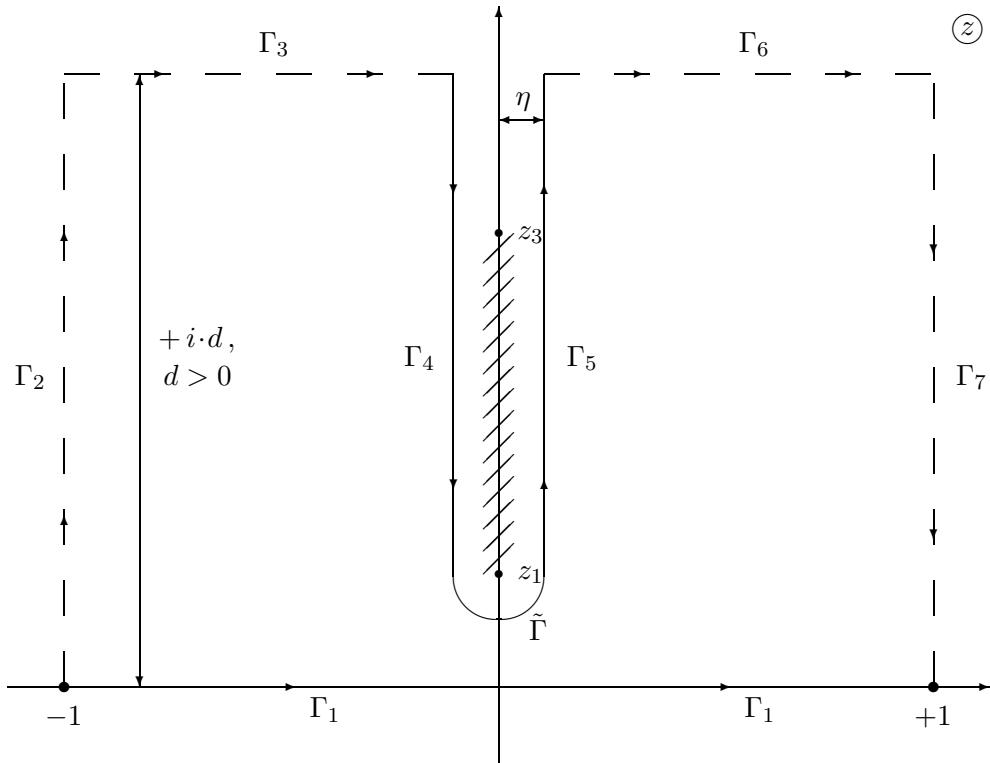


Abbildung D.1: Integrationsweg in der komplexen Ebene ($\eta \geq 0$)

$$\text{Es gilt somit: } I = \lim_{\eta \rightarrow 0} \sum_{i=2}^7 J_i.$$

Aufgrund der Periodizität von h (5.21) ist

$$h(is - 1) = h(is + 1),$$

so daß sich wegen der entgegengesetzten Laufrichtung die Integrale über die Wege Γ_2 und Γ_7 gegenseitig aufheben:

$$J_2 + J_7 = 0.$$

Da $h(id + s)$ in J_3 und J_6 lediglich von der Ordnung $O(d)$ ist, und folglich der Betrag des Integranden vom $\exp(-L\pi d)$ -Term dominiert wird, verschwinden diese Integrale für $d \rightarrow \infty$ nach Standardabschätzung:

$$\lim_{d \rightarrow \infty} J_3 = \lim_{d \rightarrow \infty} J_6 = 0.$$

Im Limes $\eta \rightarrow 0, d \rightarrow \infty$ verbleibt somit die Integration entlang des linken und rechten Schlitz-Ufers:

$$\begin{aligned} I &= \lim_{\eta \rightarrow 0} \lim_{d \rightarrow \infty} (J_4 + J_5) \\ &= i \int_{m_0/\pi}^{\infty} \lim_{\eta \rightarrow 0} \{h(is + \eta) - h(is - \eta)\} \exp(-L\pi s) ds. \end{aligned} \quad (\text{D.1})$$

Anhang E

Gammafunktionen

Im Kapitelabschnitt 5.3 werden folgende Integrale benötigt [59]:

$$\begin{aligned} \int_0^\infty \frac{1}{\sqrt{r}} \exp(-L\pi r) dr &= \frac{\Gamma(\frac{1}{2})}{\sqrt{L\pi}} = \frac{1}{\sqrt{L}} ; \\ \int_0^\infty \sqrt{r} \exp(-L\pi r) dr &= \frac{\Gamma(\frac{3}{2})}{(L\pi)^{3/2}} = \frac{1}{2\pi} \cdot \frac{1}{L^{3/2}} ; \\ \int_0^\infty r^{3/2} \exp(-L\pi r) dr &= \frac{\Gamma(\frac{5}{2})}{(L\pi)^{5/2}} = \frac{3}{4\pi^2} \cdot \frac{1}{L^{5/2}} ; \\ \int_0^\infty r^{5/2} \exp(-L\pi r) dr &= \frac{\Gamma(\frac{7}{2})}{(L\pi)^{7/2}} = \frac{15}{8\pi^3} \cdot \frac{1}{L^{7/2}} ; \\ \int_0^\infty r^{7/2} \exp(-L\pi r) dr &= \frac{\Gamma(\frac{9}{2})}{(L\pi)^{9/2}} = \frac{105}{16\pi^4} \cdot \frac{1}{L^{9/2}} ; \\ \int_0^\infty r^{9/2} \exp(-L\pi r) dr &= \frac{\Gamma(\frac{11}{2})}{(L\pi)^{11/2}} = \frac{945}{32\pi^5} \cdot \frac{1}{L^{11/2}} . \end{aligned}$$

Dabei wurde benutzt:

$$\Gamma(\frac{1}{2}) = \sqrt{\pi} \quad \text{und} \quad \Gamma(x+1) = x \cdot \Gamma(x) .$$

Da diese in Kapitel 6.4 benötigt werden, seien sie einzeln aufgeführt:

$$\begin{aligned} \Gamma(\frac{3}{2}) &= \frac{\sqrt{\pi}}{2}, & \Gamma(\frac{5}{2}) &= \frac{3}{4}\sqrt{\pi}, & \Gamma(\frac{7}{2}) &= \frac{15}{8}\sqrt{\pi}, \\ \Gamma(\frac{9}{2}) &= \frac{105}{16}\sqrt{\pi}, & \Gamma(\frac{11}{2}) &= \frac{945}{32}\sqrt{\pi}, & \Gamma(\frac{13}{2}) &= \frac{10395}{64}\sqrt{\pi} . \end{aligned}$$

Eine Substitution auf Gauß-Integrale liefert übrigens dieselben Ergebnisse.

Literaturverzeichnis

- [1] E.W. Montroll, Physics Today, Februar 1977, 77
- [2] S. Kobe,
„Das Ising-Modell - gestern und heute“,
Physikalische Blätter **54**, 917 (1998);
siehe auch: www.physik.tu-dresden.de/itp/members/kobe/isingsphbl/
- [3] D. Atack, O.K. Rice, Discuss. Faraday Soc. **15**, 210 (1953)
- [4] E. Ising,
„Beitrag zur Theorie des Ferromagnetismus“,
Zeitschrift f. Physik **31**, 253 (1925);
ins Englische übersetzt: www.fh-augsburg.de/~harsch/anglica/Chronology/20thC/Ising/isi_fm00.html
- [5] R. Peierls,
„On Ising's Model of Ferromagnetism“,
Proc. Cambridge Phil. Soc. **32**, 477 (1936)
- [6] H.A. Kramers, G.H. Wannier, Phys. Rev. **60**, 252 (1941)
- [7] E. Montroll, J. Chem. Phys. **9**, 706 (1941); **10**, 61 (1942)
- [8] R. Kubo, Busseiron Kenkyu **1**, 1 (1943)
- [9] L. Onsager,
„Crystal Statistics I: A Two-Dimensional Model
with an Order-Disorder-Transition“,
Phys. Rev. **65**, 117 (1944)
- [10] S. Klessinger, G. Münster, Nucl. Phys. **B 386**, 701 (1992)
- [11] C. Domb, Adv. Phys. **9**, 149 (1960)
- [12] G. Münster, Int. J. Mod. Phys. **C 3**, 879 (1992)
- [13] S. Klessinger, „Numerische Untersuchungen der
Oberflächenspannung im drei-dimensionalen Isingmodell“,
Diplomarbeit, Universität Münster (1992)
- [14] R.B. Griffiths, Phys. Rev. Lett. **24**, 1479 (1970)

LITERATURVERZEICHNIS

- [15] B. Kaufman,
„Crystal Statistics II: Partition Function Evaluated by Spinor Analysis“,
Phys. Rev. **76**, 1232 (1949)
- [16] I. Montvay, G. Münster, Quantum Fields on a Lattice,
Cambridge University Press (1994)
- [17] T. Schultz, D. Mattis, E. Lieb,
„Two-Dimensional Ising Model as a Soluble Problem of Many Fermions“,
Rev. Mod. Phys. **36**, 856 (1964)
- [18] P. Jordan, E. Wigner, Z. Physik **47**, 631 (1928)
- [19] C. Itzykson, J.M. Drouffe, Statistical Field Theory, Vol. 1,
Cambridge University Press (1989)
- [20] P. Cyrys, „Sektoren im zweidimensionalen Ising-Modell“,
Examensarbeit, Universität Münster (1997)
- [21] J. Smit, Introduction to Quantum Fields on a Lattice,
Cambridge University Press, 2002
- [22] G. Münster, Nucl. Phys. **B 324**, 630 (1989)
- [23] M. Hasenbusch, K. Pinn, Phys. **A 192**, 342 (1993)
- [24] M. Hasenbusch, K. Pinn, Phys. **A 203**, 189 (1994)
- [25] V. Privman, M.E. Fisher, J. Stat. Physics **33**, 385 (1983)
- [26] W. Lenz, „Beitrag zum Verständnis der
magnetischen Erscheinungen in festen Körpern“,
Phys. Zeitschrift **21**, 613 (1920)
- [27] E. Ising,
„Beitrag zur Theorie des Ferro- und Paramagnetismus“,
Dissertationsschrift, Universität Hamburg (1924);
Bibliotheca Augustana: www.fh-augsburg.de/~harsch/germanica/Chronologie/20Jh/Ising/isi_fe00.html
- [28] W. Heisenberg, Zeitschrift f. Physik **49**, 619 (1928)
- [29] S.G. Brush, Rev. Mod. Phys. **39**, 883 (1967)
- [30] R.B. Griffiths, Phys. Rev. **136**, A437 (1964)
- [31] R. Peierls, Math. Rev. **32**, 1206 (1966)
- [32] K. Huang, Statistical Mechanics, second edition, John Wiley & Sons (1987);
deutschsprachige Ausgabe:
K. Huang, Statistische Mechanik III, BI-Verlag Mannheim (1964)
- [33] C.N. Yang, „The Spontaneous Magnetization of a
Two-Dimensional Ising Model“, Phys. Rev. **85**, 809 (1952)

- [34] B.L. van der Waerden, Z. Physik **118**, 473 (1941)
- [35] M. Kac, J.C. Ward
„A Combinatorial Solution of the Two-Dimensional Ising Model“,
Phys. Rev. **88**, 1332 (1952)
- [36] S. Kobe, „Ernst Ising 1900-1998“,
Brazilian Journal of Physics **30**, 649 (2000)
- [37] D.W. Heermann, Computer Simulation Methods in Theoretical Physics,
Second Edition, Springer-Verlag (1990)
- [38] E. Callen, D. Shapero, Phys. Today, Juli 1974, 23
- [39] G.A. Kohring, J. Phys. I France **6**, 301 (1996)
- [40] E.E. Peters, Chaos and Order in the Capital Markets,
Wiley & Sons (1991)
- [41] J.J. Hopfield, Proc. Natl. Acad. Sci. USA **79**, 2554 (1982)
- [42] R.B. Potts, Proc. Camb. Phil. Soc. **48**, 106 (1952)
- [43] D. Sherrington, S. Kirkpatrick, Phys. Rev. Lett. **35**, 1792 (1975)
- [44] R. Brauer, H. Weyl, Am. J. Math. **57**, 425 (1935)
- [45] W. Nolting, Grundkurs Theoretische Physik,
Band 6: Statistische Physik, 3. Auflage, Vieweg (1998)
- [46] G. Münster, persönliche Mitteilung, 2002
- [47] T. Schultz, D. Mattis, E. Lieb, Ann. Phys. **16**, 407 (1961)
- [48] E. Lieb, D. Mattis, Phys. Rev. **125**, 164 (1962)
- [49] T. Schultz, J. Math. Phys. **4**, 666 (1963)
- [50] G. Münster, Notizen, 2001
- [51] J. Bardeen, L. Cooper, J. Schrieffer, Phys. Rev. **108**, 1175 (1957)
- [52] P.W. Anderson, Phys. Rev. **112**, 1900 (1958)
- [53] N.N. Bogolubov, Nuovo Cimento **7**, 794 (1958)
- [54] J.G. Valatin, Nuovo Cimento **7**, 843 (1958)
- [55] A.E. Ferdinand, M.E. Fisher, Phys. Rev. **185**, 832 (1969)
- [56] P. Hoppe, „Tunneleffekt und Energieaufspaltung im
dreidimensionalen ϕ^4 -Modell mit Pauli-Villars-Regularisierung“,
Diplomarbeit, Universität Münster (1993);
<http://pauli.uni-muenster.de/menu/Paper.html>

LITERATURVERZEICHNIS

- [57] K. Jänich, Analysis f. Physiker u. Ingenieure,
Springer (1983)
- [58] I.S. Gradstein, I.M. Ryshik,
Summen-, Produkt- und Integraltafeln, Teil I und II,
Verlag Harri Deutsch (1981)
- [59] I.N. Bronstein, K.A. Semendjajew, G. Musiol, H. Mühlig,
Taschenbuch der Mathematik, 3.Auflage,
Verlag Harri Deutsch (1997)
- [60] M. Abramowitz, I.A. Stegun,
Handbook of Mathematical Functions,
9. Druck, Dover Publications (1970)
- [61] C. Domb, Phil. Mag. Suppl. **9**, 151 (1960)
- [62] G. Münster, Skriptum zur Vorlesung Quantentheorie I, WS 02/03;
<http://pauli.uni-muenster.de/menu/Lehre/quantws02/> (Stand: 2002)
- [63] M. LeBellac, Quantum and Statistical Field Theory,
Clarendon Press, Oxford (1991)
- [64] F. Rühs, Funktionentheorie,
VEB Deutscher Verlag der Wissenschaften (1962)

Danksagung

An dieser Stelle möchte ich all denen danken, die mich bei der Anfertigung dieser Arbeit unterstützt haben.

Zuallererst danke ich meinen Eltern, die mir dieses Studium ermöglicht haben und deren Unterstützung ich mir immer sicher sein konnte.

Herrn Prof. G. Münster danke ich für die interessante und meinen Wünschen entsprechende Themenstellung sowie für seine stets freundliche Betreuung, durch die diese Arbeit in zwangloser Atmosphäre entstehen konnte.

Hierzu trug auch die Besatzung von R. 419 bei, in dem immer eine fröhlich-lockere Stimmung herrschte.

Ein besonderes Dankeschön gilt Melanie Müller, die interessiert und hilfsbereit bei manchen Problemstellungen ihr Wissen anbot.

Diese Arbeit wurde mit dem Zeichensatz-Programm L^AT_EX erstellt.

Für einige graphische Darstellungen wurde das Computeralgebra-Programm MAPLE verwendet.

Hiermit versichere ich, diese Arbeit selbstständig angefertigt und keine außer den genannten Hilfsmitteln verwendet zu haben.

Münster, im Januar 2003

