

2-dimensionale Statistische Modelle

Vorlesung Sommersemester 1998

von

Thomas Filk

Inhaltsverzeichnis

0.1	Allgemeine Definitionen	4
0.2	Transfermatrix	6
0.3	Theorie des Phasenübergangs	8
0.4	Das 1-dimensionale Ising-Modell	11
0.5	Das 2-dimensionale Ising-Modell	13
0.6	Quanten-Spinketten	23
0.7	Zweidimensionale reine Gittereichtheorien	28
0.8	Verschiedene 2-dimensionale Spin-Modelle	30
0.9	Das 6- und 8-Vertex-Modell	41
0.10	Der Bethe-Ansatz für das 6-Vertex-Modell	54

0.1 Allgemeine Definitionen

Ein 2-dimensionales Gitter wird in dieser Vorlesung fast immer ein reguläres, quadratisches Gitter sein. Es besteht aus einer Menge $P \subset \mathbf{Z} \times \mathbf{Z}$ von Punkten (z.B. $P = \{(m_1, m_2) \mid |m_i| < L/2\}$), dabei dient L als ein Volumen Cut-off), einer Menge E von Linien (edges) (d.h. Paare von Punkten, die sich nur in einer Koordinate um ± 1 unterscheiden), sowie Plaketten F (faces).

Lokale Zustände werden indiziert durch eine Menge V , z.B. $V = \{+1, -1\}$ beim Ising-Modell, $V = \{0, 1, 2\}$ beim Potts-Modell oder $V = \mathbb{R}$ für ein skalares Feld.

Eine Konfiguration ist eine Festlegung von lokalen Zuständen auf den Gitterpunkten, manchmal auch Gitterlinien oder Plaketten, d.h. eine Konfiguration ist eine Abbildung:

$$C : P \rightarrow V \quad \text{bzw.} \quad C : E \rightarrow V \quad \text{oder} \quad C : F \rightarrow V$$

Ganz allgemein können sowohl Punkten, wie auch Linien und Plaketten gleichzeitig lokale Werte zugeordnet werden und diese auch in verschiedenen Bildräumen liegen:

$$C : P \times E \times F \rightarrow V_P \times V_E \times V_F .$$

Der Konfigurationsraum ist die Menge aller Konfigurationen, also die Menge aller dieser Abbildungen. (Im Sinne der Wahrscheinlichkeitstheorie bilden die Konfigurationen die Menge der Elementarereignisse. Funktionen von C – insbesondere der Wert von C an bestimmten Gitterpunkten oder -linien – bilden die Menge der Zufallsvariablen.)

Ein Zustand ist ein lineares, positives, normiertes Funktional auf der Menge der (komplexwertigen) Funktionen über dem Konfigurationsraum. Sei Ω der Konfigurationsraum, $F(\Omega)$ der Vektorraum der komplexen Funktionen

$$F(\Omega) := \{f \mid f : \Omega \rightarrow \mathbb{C}\} ,$$

dann ist ein Zustand

$$\omega : F(\Omega) \rightarrow \mathbb{C} ,$$

mit

$$\begin{aligned} \omega(\alpha_1 f_1 + \alpha_2 f_2) &= \alpha_1 \omega(f_1) + \alpha_2 \omega(f_2) && \text{(linear)} \\ \omega(f) &\geq 0 \quad \text{falls} \quad f(C) \geq 0 \quad \forall C && \text{(positiv)} \\ \omega(\text{id}) &= 1 \quad \text{mit} \quad \text{id}(C) = 1 \quad \forall C && \text{(normiert)} \end{aligned}$$

Einen Zustand nennt man auch manchmal ein Erwartungswertfunktional. Für reelle Funktionen heißt $F(\Omega)$ auch manchmal der Raum der Observablen. (Dieser Zustandsbegriff schließt die Vorstellung von Hilbertraumvektoren $|\psi\rangle$ als Zustände in der Quantenmechanik ein: Jeder Zustand $|\psi\rangle$ definiert ein Erwartungswertfunktional auf den Observablen: $A \rightarrow \langle \psi | A | \psi \rangle$.)

Bei abzählbaren Konfigurationsräumen definiert ein Zustand eine Wahrscheinlichkeitsverteilung auf der Menge der Konfigurationen. Sei

$$\chi_i \equiv \chi_{[C_i]} : \Omega \rightarrow \mathbb{C} \quad \text{mit} \quad \chi_{[C_i]}(C) = \begin{cases} 1 & \text{falls } C = C_i \\ 0 & \text{sonst} \end{cases}$$

die charakteristische Funktion für die Konfiguration C_i , dann ist

$$p_i = \omega(\chi_i)$$

eine Wahrscheinlichkeitsverteilung auf den Zuständen. Umgekehrt definiert jede Wahrscheinlichkeitsverteilung auch einen Zustand. (Ist der Konfigurationsraum nicht abzählbar, so hat man χ_i durch die charakteristische Funktion einer messbaren Menge auf dem Konfigurationsraum zu ersetzen und p_i ist dann das Maß, welches durch den Zustand dieser Menge zugeordnet wird.)

Oft nennt man die Wahrscheinlichkeit p_i für eine Konfiguration auch deren Gewicht. Ein positives Funktional auf dem Konfigurationsraum ($E(C) \geq 0$) erlaubt die Definition eines so genannten Boltzmann-Faktors

$$\hat{p}(C) = \exp(-\beta E[C]) .$$

E hat in der statistischen Mechanik die Interpretation einer Energie, β die einer inversen Temperatur. Die Zustandssumme erhält man durch Summation über alle Konfigurationen, wobei jede Konfiguration entsprechend gewichtet wird:

$$Z[\beta] = \sum_C \exp(-\beta E[C])$$

$\hat{p}(C)$ definiert wiederum einen Zustand (bzw. ein Erwartungswertfunktional) mit

$$p(C) = \frac{1}{Z} \exp(-\beta E[C]) \quad \text{bzw.} \quad \omega(f) = \langle f \rangle = \frac{1}{Z} \sum_C f(C) \exp(-\beta E[C]) .$$

Aus der Zustandssumme erhält man die freie Energie F bzw. die freie Energie pro Volumen f :

$$F = -\frac{1}{\beta} \ln Z \quad f = -\frac{1}{\beta L^2} \ln Z .$$

Die so definierten thermodynamischen Größen sind immer bei endlichem Volumen zu berechnen. So ist z.B. die freie Energie pro Volumen noch eine Funktion von L . Für den thermodynamischen Limes $L \rightarrow \infty$ (einem Grenzwert, für welchen die Boltzmannfaktoren oft nicht für alle Konfigurationen definierbar sind) konvergiert die Folge f_L jedoch gegen einen Grenzwert f_∞ . Dies ist die thermodynamische freie Energiedichte. Ähnliches gilt für das Erwartungswertfunktional.

Abgesehen von der Temperatur $T = 1/\beta$ hängt die freie Energie oft noch von anderen Parametern $\{\mu\}$ ab (chemisches Potential, äußeres Magnetfeld, etc.). Ein Phasenübergang ist ein Punkt (oder allgemeiner eine Teilmenge) innerhalb des Parameterraums $(\beta, \{\mu\})$, für den f_∞ nicht reell-analytisch ist. Die Ordnung eines Phasenübergangs wird dabei meist über die Ableitbarkeit definiert, d.h. ist f_∞ nur k -mal stetig differenzierbar, so spricht man von einem Phasenübergang $(k+1)$.ter Ordnung.

Unter einem kritischen Punkt versteht man einen Punkt im Parameterraum, bei welchem Responzfunktionen (z.B. die Suszeptibilität) divergieren, oder aber räumliche oder zeitliche Korrelationen langreichweitig werden, d.h. einem Potenzgesetz genügen. (Da Suszeptibilitäten integrierte Korrelationsfunktionen sind, divergieren diese im Allgemeinen für langreichweitige Korrelationen.) Wir werden sehen, dass ein Phasenübergang meist auch ein kritischer Punkt ist. Allerdings gibt es Fälle, wo man von "kritischem Punkt" sprechen würde, nicht aber von einem Phasenübergang. (Beispiele: 1-dim. Ising Modell bei $T = 0$; oder das freie Gaussche Feld mit lokaler Variable $\varphi \in \mathbb{R}$ und Energie zwischen benachbarten Punkten $E = (\varphi_i - \varphi_j)^2$. Diese Theorie hat keinen Phasenübergang, ist aber für alle Temperaturen kritisch.) Diese strenge Unterscheidung zwischen Phasenübergang und kritischem Punkt wird allerdings oft in der Literatur nicht gemacht.

0.2 Transfermatrix

Der Transfermatrixformalismus ist allgemein anwendbar auf Gitter des Typs $\mathcal{G} \times \mathbf{Z}$, wobei \mathcal{G} ein beliebiger Graph ist (d.h. eine Menge von Punkten und Linien, welche zwei Punkte als benachbart kennzeichnen). Die durch \mathbf{Z} durchnummerierte Koordinate heißt manchmal “Zeit”-Richtung, der Teil \mathcal{G} “räumliches” Gitter. Sei x eine Durchnummerierung der Punkte von \mathcal{G} , so kennzeichnet (x, t) ($t \in \mathbf{Z}$) einen Punkt im Gitter. Man kann sich bei einem 2-dimensionalen Gitter den “Graphen” \mathcal{G} immer als die Menge \mathbf{Z} vorstellen, mit der naheliegenden Definition benachbarter Punkte. Im folgenden seien die lokalen Freiheitsgrade auf den Gitterpunkten definiert. Für Vertexmodelle, bei denen die Variable auf Gitterlinien liegen, werden wir ohnehin später eine leicht abgewandelte Form der Transfermatrix formulieren.

Wir konstruieren zunächst den “Hilbertraum” der Zustände auf dem räumlichen Gitter. Sei \mathcal{H}_x der komplexe Vektorraum der lokalen Zustände am Punkte x , d.h. der Vektorraum der komplexwertigen Funktionen über den lokalen Zuständen. Handelt es sich z.B. lokal um Spin-Zustände $s_x = \pm 1$, so ist \mathcal{H}_x ein (komplex) 2-dimensionaler Vektorraum. Für ein reelles Feld ist \mathcal{H}_x der Vektorraum der quadratintegrierbaren Funktionen über der reellen Achse. Wir definieren zu einem räumlichen (im allgemeinen $(d-1)$ -dimensionalen) Gitter einen Zustandsraum

$$\mathcal{H} = \bigotimes_{x \in \mathcal{G}} \mathcal{H}_x \quad ,$$

dies ist gleichzeitig der Raum aller (komplexwertigen) Funktionen über den Zuständen auf \mathcal{G} . Das Skalarprodukt in \mathcal{H} ist das Produkt der Skalarprodukte in \mathcal{H}_x . Eine mögliche Basis in \mathcal{H} sind die Zustände

$$|\{\varphi\}\rangle = \bigotimes_{x \in \mathcal{G}} |\varphi_x\rangle \quad (\varphi_x \in V \simeq \text{lokale Zustnde}) \quad .$$

Im diskreten Fall sind das die charakteristischen Funktionen zu einer Konfiguration $\{\varphi_x\}$. In Anlehnung an die “Ortsraumbasis” in der Quantenmechanik könnte man diese Basis die “Konfigurationsraumbasis” nennen.

Entsprechend der Aufspaltung des Gitters in ein räumliches Hypergitter und eine Zeitrichtung spalten wir auch die Energie auf, dabei wird vorausgesetzt, da es nur Wechselwirkungsterme zwischen nächsten Nachbarn gibt:

$$\begin{aligned} \sum_{\langle\langle x,t \rangle\rangle, \langle\langle x',t' \rangle\rangle} E(\varphi(x,t), \varphi(x',t')) &= \\ &= \sum_t \sum_x E(\varphi(x,t), \varphi(x,t+1)) + \sum_t \sum_{\langle x,x' \rangle} E(\varphi(x,t), \varphi(x',t)) \quad . \end{aligned}$$

(Die Notation \langle , \rangle bezeichnet nächste Nachbarn auf einem Gitter.)

Wir definieren nun die Transfermatrix T als linearen Operator auf \mathcal{H} durch seine Matrixelemente in der Konfigurationsraumbasis

$$\begin{aligned} T_{\varphi,\psi} &\equiv \langle \varphi | T | \psi \rangle \\ &= e^{-\beta \sum_x E(\varphi(x), \psi(x))} e^{-\frac{1}{2} \beta \sum_{\langle x,x' \rangle} [E(\varphi(x), \varphi(x')) + E(\psi(x), \psi(x'))]} \quad . \end{aligned}$$

Die so definierte Transfermatrix ist offensichtlich reell und symmetrisch, d.h., ihre Eigenwerte sind reell.

Da außerdem $T_{\varphi,\psi} > 0$ lässt sich zeigen, dass der höchste Eigenwert von T positiv und nicht entartet ist. Dies folgt aus dem so genannten Frobenius–Perron Theorem über positive Matrizen (siehe nächsten Abschnitt). Im Allgemeinen sind die Eigenwerte von T nicht notwendigerweise positiv. Die Eigenwerte von T^2 sind jedoch (da T symmetrisch ist) immer positiv, so dass

$$T^2 = \exp(-2aH) \quad H \text{ hermitisch, } a \in \mathbb{R}^+ .$$

a ist eine positive Zahl, ein Maß für den Gitterabstand in Zeit-Richtung, und H kann als Hamilton-Operator der Gittertheorie aufgefasst werden.

Für die Zustandssumme auf einem periodischen Raum-Zeit-Gitter, welches in Zeit-Richtung die Länge L hat, gilt offensichtlich

$$Z = \text{tr } T^L = \sum_n \lambda_n^L \quad \lambda_n \text{ sind die Eigenwerte von } T . \quad (1)$$

Dazu macht man sich klar, dass die Definition der Spur bzw. der Matrixmultiplikation für T zur Summation über alle Konfigurationen führt.

In der Konfigurationsraumbasis können wir in \mathcal{H} einen ausgezeichneten Satz von Operatoren definieren: Operatoren $\Phi(x)$, die in dieser Basis diagonal sind, und Operatoren $P_\delta(x)$, die die Basis verschieben:

$$\Phi(x)|\varphi\rangle = \varphi(x)|\varphi\rangle \quad P_\delta(x)|\dots, \varphi(x), \dots\rangle = |\dots, \varphi(x) + \delta, \dots\rangle$$

P_δ entspricht also dem exponenzierten Impulsoperator der Quantenmechanik, der Ortseigenzustände um δ translatiert. Die Notation ist übrigens im Allgemeinen nur symbolisch: P_δ verändert den Zustand zu einer Konfiguration in bestimmter Weise. Das kann bei reellen Feldern die Addition einer Konstanten sein, das kann aber auch (z.B. bei Gruppen) in der Multiplikation mit einem generierenden Gruppenelement bestehen. Ebenso ist $\Phi(x)$ ein Operator für die Koordinaten einer Konfiguration, nicht für die Konfiguration selber. Man kann nun (was hier nicht geschehen soll) jeden Operator auf \mathcal{H} , insbesondere auch die Transfermatrix, durch die Operatoren $\Phi(x)$ und $P_\delta(x)$ ausdrücken.

Im Ising-Modell sind z.B. in der Basis

$$|+\rangle \simeq \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \quad |-\rangle \simeq \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \quad (2)$$

die Matrizen Φ und P durch

$$\Phi = \sigma_3 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \quad \text{und} \quad P = \sigma_1 = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \quad (3)$$

gegeben.

Auch Erwartungswerte lassen sich im Operatorformalismus ausdrücken, z.B.

$$\langle \varphi(x, t) \varphi(x', t') \rangle = \lim_{L \rightarrow \infty} \frac{\text{tr } \Phi(x') T^{t'-t} \Phi(x) T^{L-(t'-t)}}{\text{tr } T^L} . \quad (4)$$

Im Grenzfall $L \rightarrow \infty$ trägt von allen Zuständen nur der Grundzustand von H (d.h. der Zustand zum höchsten Eigenwert der Transfermatrix) bei.

0.3 Theorie des Phasenübergangs

DIE FREIE ENERGIE

Seien $\lambda_1 \geq \lambda_2 \dots \geq \lambda_M$ die Eigenwerte der Transfermatrix. Dann gilt für die Zustandssumme bzw. die mittlere freie Energie F auf einem räumlichen Gitter

$$Z = \sum_{i=1}^M \lambda_i^L = \lambda_1^L \left(s + \sum_{i \neq 1}^M \left(\frac{\lambda_i}{\lambda_1} \right)^L \right)$$

$$-\beta F = \lim_{L \rightarrow \infty} \frac{1}{L} \left[L \ln \lambda_1 + \ln \left(1 + \sum_{i \neq 1}^M \left(\frac{\lambda_i}{\lambda_1} \right)^L \right) \right] \approx \ln \lambda_1(\beta)$$

Hierbei wurde vorausgesetzt, dass $\lambda_i/\lambda_1 < 1$, so dass die Korrekturterme für $L \rightarrow \infty$ zu vernachlässigen sind. Wir werden später noch den Fall eines kontinuierlichen Spektrums behandeln.

Eine Nicht-Analytizität der freien Energie (also ein Phasenübergang) kann nur dann auftreten, wenn die zwei höchsten Eigenwerte entarten, z.B. bei einem Level-Crossing.

Beispiel: Sei

$$T = \begin{pmatrix} 1 & e^\beta - 2 \\ e^\beta - 2 & 1 \end{pmatrix} \quad \text{dann ist} \quad \lambda_{1/2} = 1 \pm (e^\beta - 2) .$$

Der grte Eigenwerte, d.h. die "freie Energie", ist somit

$$\lambda_{\max} = \begin{cases} e^\beta - 1 & \text{fr } \beta < \ln 2 \\ 3 - e^\beta & \text{fr } \beta \geq \ln 2 \end{cases} .$$

Offensichtlich hat λ_{\max} bzw. F eine Knickstelle bei $\beta = \ln 2$.

Es scheint zunächst keinen Grund zu geben, warum dieser Fall nicht bei der Transfermatrix zu einem statistischen System auftritt. Es soll jedoch gezeigt werden, dass für Systeme mit endlich vielen Freiheitsgraden in einer Hyperebene dies nicht geschehen kann.

Grund ist, dass für $\beta < \infty$ ($T \neq 0$) die Matrixelemente der Transfermatrix echt positiv sind.

SATZ VON FROBENIUS UND PERRON: Sei A eine positive ($N \times N$)-Matrix (d.h. $A_{ij} > 0$ fr alle i, j). Dann gilt:

1. A hat einen positiven Eigenwert λ_{\max} , gleich dem spektralen Radius von A .
2. Dieser Eigenwert ist nicht entartet, fr alle anderen Eigenwerte gilt $|\lambda| < \lambda_{\max}$.
3. Es gibt einen Eigenvektor (x_1, \dots, x_N) zu λ_{\max} mit $x_i > 0$.

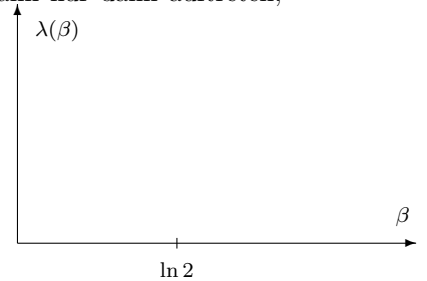
Der Satz gilt ganz allgemein fr eine positive Matrix, er soll hier jedoch nur fr eine symmetrische Matrix bewiesen werden, da diese Annahme den Beweis erheblich vereinfacht und fr Transfermatrizen auch keine Einschränkung des allgemeinen Falls bedeutet.

BEWEIS: Sei y irgendein Vektor und x der zugehörige Vektor mit Komponenten $x_i = |y_i|$. Dann gilt

$$(y, Ay) = \sum_{ij} A_{ij} y_i y_j \leq \sum_{ij} A_{ij} x_i x_j = (x, Ax) . \quad (5)$$

Daraus folgt, da

$$\lambda_{\max} = \max_{|x|=1} (x, Ax) \quad (6)$$



fr x mit $x_i > 0$ angenommen wird. (Der Fall $x_i = 0$ kann ausgeschlossen werden indem man sich berzeugt, da ein neuer Vektor mit $x_i = \epsilon$ obigen Ausdruck linear in ϵ vergrößert, allerdings die Norm nur quadratisch vermindert.) Gl. 6 bestimmt aber gleichzeitig den maximalen Eigenwert λ_{\max} sowie den zugehörigen Eigenvektor. Dieser Eigenwert ist nicht entartet, da (5) zu einer echten Ungleichung wird, falls $x \neq \pm y$. \square

Wir haben bei diesem Theorem eine endliche Matrix vorausgesetzt, d.h. es gilt auf jeden Fall fr Spinsysteme auf endlichem räumlichen Gitter. Hat man lokal kontinuierliche Variable, so lt sich das Theorem (mit hnlicher Beweisidee) verallgemeinern, vorausgesetzt es gilt

$$\langle \varphi' | T | \varphi \rangle \leq C < \infty \quad \text{und} \quad \langle \varphi' | T | \varphi \rangle \geq \epsilon > 0 \quad \forall \varphi, \varphi' .$$

Gerade diese zweite Bedingung bricht jedoch zusammen fr unendliche Systeme. Schon beim Ising-Modell ist die Energie nicht mehr beschrnkt fr ein unendliches räumliches Gitter (und damit die Elemente der Transfermatrix nicht mehr echt positiv).

Die Unbeschrnktheit der Energie bedeutet natrlich im allgemeinen nicht die Existenz eines Phasenübergangs. Es gibt viele Modelle, fr die das Spektrum kontinuierlich ist. Es soll im folgenden gezeigt werden, da die freie Energie pro räumliches Hypergitter trotzdem durch den maximalen Eigenwert der Transfermatrix gegeben ist. Die Schlufolgerung wird sein, da es nicht auf die Diskretheit des maximalen Eigenwerts beim Phasenübergang ankommt, sondern da wirklich ein Level-crossing auftritt.

Angenommen das Spektrum der Transfermatrix lt sich in einer Umgebung von λ_{\max} durch einen Parameter k indizieren, so da der maximale Eigenwert fr $k = 0$ angenommen wird und folgende Entwicklung mglich ist:

$$\ln \lambda(k) = \ln \lambda_{\max} - \alpha |k|^\gamma + o(|k|^\gamma)$$

(Dabei bedeuten $o(x)$ Terme, fr die $\lim_{x \rightarrow 0} o(x)/x = 0$.) Die Zustandssumme ist somit:

$$\begin{aligned} Z &= \int dk (\lambda(k))^L = \lambda_{\max}^L \int dk e^{-L\alpha |k|^\gamma + o(|k|^\gamma)} \\ &= \lambda_{\max}^L L^{1/\gamma} \text{const.} (1 + r(L)) \end{aligned}$$

Fr den Restterm $r(L)$ gilt $\lim_{L \rightarrow \infty} r(L) = 0$. Daraus folgt wiederum

$$F = - \lim_{L \rightarrow \infty} \frac{1}{\beta L} \ln Z = - \frac{1}{\beta} \ln \lambda_{\max} .$$

KORRELATIONSFUNKTIONEN

Es soll im Rahmen des Transfermatrix-Formalismus argumentiert werden, unter welchen Umstnden Korrelationsfunktionen langreichweitig werden, und warum dies im allgemeinen bei Phasenübergngen auftritt.

Dazu untersuchen wir zunchst den Fall, da zwischen dem maximalen Eigenwert der Transfermatrix und dem folgenden Eigenwert eine nicht-verschwindende Differenz ist. Man spricht in diesem Fall auch oft von einem Energie-gap oder Massen-gap, da in einem Teilchenbild der Hamiltonschen Formulierung diese Differenz (zwischen Vakuumsenergie und erstem angeregten Zustand) der Masse des leichtesten Teilchens entspricht.

Wir betrachten ein Matrixelement der Form $(a, T^L b)$ und entwickeln die Vektoren a und b nach (normierten) Eigenvektoren x_k der Transfermatrix:

$$(a, T^L b) = \sum_{k,l} \alpha_k \beta_l (x_k, T^L x_l) = \sum_k \alpha_k \beta_k \lambda_k^L$$

$$= \lambda_1^L \left(\alpha_1 \beta_1 + \left(\frac{\lambda_2}{\lambda_1} \right)^L \alpha_2 \beta_2 + \dots \right) . \quad (7)$$

Für große Werte von L werden Korrelationen zwischen a und b (z.B. über ihre relative Richtung) exponentiell unterdrückt. Dies bedeutet z.B. auch, daß die Wahl von Randbedingungen sich nur "exponentiell" tief in das Innere des Gitters bemerkbar macht. Setzt man eine entsprechende Entwicklung in Erwartungswerte der Form (4) ein, so folgt für große Werte von L

$$\langle \varphi(0) \varphi(L) \rangle = \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{\text{tr } \Phi T^L \Phi T^{N-L}}{\text{tr } T^N} \rightarrow c_0 + c_1 \left(\frac{\lambda_2}{\lambda_1} \right)^L + \dots .$$

Dies ist das typische Verhalten für Korrelationsfunktionen mit kurzreichweisigem Verhalten.

Sind andererseits die zwei tiefsten Eigenwerte entartet, so gilt statt (43)

$$(a, T^L b) = \lambda_1^L (\alpha_1 \beta_1 + \alpha_2 \beta_2 \dots) .$$

Gewisse "Informationen" über die relative Lage von a und b werden nun also über beliebig große Abstände L übertragen. Insbesondere spielen Randbedingungen nun eine Rolle. Zu den typischen Potenzgesetzen in Erwartungswerten der Form (4) kommt es allerdings nur, wenn das Spektrum von T um den höchsten Eigenwert herum kontinuierlich wird. Die Entartung des maximalen Eigenwerts bei nicht-kontinuierlichem Spektrum tritt typischerweise bei Systemen mit spontaner Symmetriebrechung auf, z.B. beim Ising-Modell für tiefe Temperaturen. Hier spielen die Randbedingungen eine wesentliche Rolle z.B. für die sich einstellende Magnetisierung.

Im 1-dimensionalen Ising-Modell (siehe nächstes Kapitel) werden für $\beta \rightarrow \infty$ (also $T \rightarrow 0$) die Korrelationen langreichweitig. Die Eigenwerte der Transfermatrix sind in diesem Grenzwert auch entartet. Im Gaußschen Modell sind die Eigenwerte der Transfermatrix kontinuierlich für alle Werte von β , entsprechend beobachtet man auch langreichweitige Korrelationen (siehe Übungsaufgaben).

0.4 Das 1-dimensionale Ising-Modell

In diesem Abschnitt werden zwei einfache Methoden vorgestellt, das 1-dimensionale Ising-Modell zu lösen. Beide Methoden sind auf den 2-dimensionalen Fall übertragbar und haben zu Lösungswegen für das 2-dimensionale Ising-Modell geführt. Eine dieser Methoden zur Lösung des 2-dimensionalen Modells wird im nächsten Kapitel besprochen. Ein dritter – vom konzeptionellen Standpunkt recht interessanter allerdings hier recht umständlicher – Weg zur Lösung des 1-dimensionalen Ising-Modells – nämlich die Methode der Blockspintransformation bzw. der Renormierungsgruppe – wird in den Übungsaufgaben gelöst.

Das Ising-Modell ist definiert durch lokale Zustände auf den Gitterpunkten, die nur zwei mögliche Werte annehmen können. Daher werden diese Freiheitsgrade oft als “Spin” bezeichnet und mit $s_i = \pm 1$ benannt. Im allgemeinen setzt sich die Energie einer Konfiguration zusammen aus einer Summe von Beiträgen von nächsten Nachbarn auf einem Gitter sowie eines Beitrags, der z.B. durch ein äußeres Magnetfeld h realisiert werden kann:

$$E[\{s_i\}] = - \sum_{\langle i,j \rangle} s_i s_j + h \sum_i s_i .$$

Damit ergibt sich für die Zustandssumme

$$Z(\beta) = \sum_{\{s_i = \pm 1\}} e^{\beta \sum_{\langle i,j \rangle} s_i s_j - \beta h \sum_i s_i} .$$

Während die Zustandssumme des 2-dimensionalen Ising-Modells nur für $h = 0$ exakt berechnet werden kann – in mehr als 2 Dimensionen sind keine exakten Lösungen bekannt – lässt sich das 1-dimensionale Modell noch in der allgemeinen Form lösen. Wir werden im folgenden jedoch nur den Fall $h = 0$ betrachten, da es sich um die Darstellung der Verfahren, insbesondere im Hinblick auf ihre Verallgemeinerung in 2 Dimensionen, handeln soll. Der Fall $h \neq 0$ wird in den Übungen behandelt.

LSUNG MIT HILFE DER TRANSFERMATRIX

Zu bestimmen ist

$$Z(\beta) = \sum_{\{s_i = \pm 1\}} e^{\beta \sum_{i=1}^L s_i s_{i+1}} . \quad (8)$$

Wir wählen periodische Randbedingungen, d.h. $s_{L+1} \equiv s_1$. Ein “raumartiges” Gitter besteht im 1-dimensionalen Fall nur aus einem Punkt. Damit folgt für die zugehörige Transfermatrix:

$$\langle s|T|s' \rangle = e^{\beta s s'} \quad \text{bzw.} \quad T = \begin{pmatrix} e^{\beta} & e^{-\beta} \\ e^{-\beta} & e^{\beta} \end{pmatrix} = e^{\beta} \mathbb{1} + e^{-\beta} \sigma_1 .$$

Die Eigenwerte dieser Transfermatrix sind

$$\lambda_{1/2} = e^{\beta} \pm e^{-\beta} = \begin{cases} 2 \cosh \beta \\ 2 \sinh \beta \end{cases} .$$

Offensichtlich ist $\lambda_{\max} = 2 \cosh \beta$. Damit folgt für die Zustandssumme und die freie Energie pro Spin:

$$Z = (2 \cosh \beta)^L + (2 \sinh \beta)^L \quad , \quad f_{\infty} = -\frac{1}{\beta} \ln(2 \cosh \beta) .$$

LSUNG DURCH SUMMATION BER WEGE

Das folgende Verfahren scheint zunchst etwas komplizierter als die direkte Methode der Diagonalisierung der Transfermatrix, hat aber doch (insbesondere falls man den Transfermatrixformalismus ganz vermeiden mchte) eine gewisse Eleganz.

Wir beobachten zunchst, da das Produkt $s_i s_{i+1}$ nur zwei mgliche Werte annehmen kann, und damit gilt:

$$e^{\beta s_i s_{i+1}} = \cosh \beta + s_i s_{i+1} \sinh \beta = \begin{cases} e^{\beta} & \text{falls } s_i s_{i+1} = 1 \\ e^{-\beta} & \text{falls } s_i s_{i+1} = -1 \end{cases} .$$

Die Zustandssumme (8) lt sich somit umformen zu

$$\begin{aligned} Z &= \sum_{\{s_i = \pm 1\}} \prod_i (\cosh \beta + s_i s_{i+1} \sinh \beta) = (\cosh \beta)^L \sum_{\{s_i = \pm 1\}} \prod_i (1 + s_i s_{i+1} \tanh \beta) \\ &= (\cosh \beta)^L \sum_{\{s_i = \pm 1\}} \left(1 + \tanh \beta \sum_i (s_i s_{i+1}) + (\tanh \beta)^2 \sum_{i \neq j} (s_i s_{i+1})(s_j s_{j+1}) + \dots \right) . \end{aligned}$$

Fr die einzelnen Terme in dieser Entwicklung kann man eine einfache graphische Darstellung einfhren. Jedes Paar $(s_i s_{i+1})$ wird durch eine Linie reprsentiert, die die Gitterpunkt i und $i+1$ verbindet. Der erste Term in der Entwicklung entspricht dann den N Gitterpunkten, ohne Verbindungslinien. Der zweite Term der Entwicklung enthlt nur Graphen, bei welchen genau ein Paar von Punkten durch Linien verbunden ist. Der dritte Term besteht aus Graphen, bei welchen zwei Linien existieren, wobei diese Linien zu verschiedenen Punktepaaren gehren. Entsprechend kann man sagen, da der k .te Term aus Graphen besteht mit $(k-1)$ bemalten Linien, smtlich verschieden. Es ist jeweils noch ber alle Kombinationsmglichkeiten zu summieren. Der letzte Term in der Entwicklung besteht wiederum nur aus einem einzigen Graphen, bei dem smtliche Linien eingezeichnet sind.

Wegen der Identitten

$$\sum_{s_i = \pm 1} 1 = \sum_{s_i = \pm 1} s_i^2 = 2 \quad \text{und} \quad \sum_{s_i = \pm 1} s_i = 0$$

folgt, da nur solche Terme zur Summation ber $\{s_i = \pm 1\}$ beitragen, bei denen entweder s_i fr jedes i gar nicht auftritt, oder aber als Quadrat. Auf keinen Fall darf fr irgendein i ein s_i nur linear auftreten. In der graphischen Darstellung entspricht das Termen, bei denen an einem Gitterpunkt eine Linie anfngt bzw. endet. Betrachtet man nun die einzelnen Terme in der graphischen Darstellung, so stellt man fest, da berhaupt nur zwei Terme einen nicht-verschwindenden Beitrag liefern, nmlich der erste (ohne Linien) und der letzte (alle Linien vorhanden). Somit folgt

$$Z = (\cosh \beta)^L \sum_{\{s_i = \pm 1\}} (1 + (\tanh \beta)^L) = (2 \cosh \beta)^L (1 + (\tanh \beta)^L) .$$

Die rechte Seite lt sich (bis auf einen Faktor) so deuten, da ber alle geschlossenen Wege (ohne Doppelbelegung von Linien) auf dem Gitter summiert wird und jeder Weg mit einem Faktor $(\tanh \beta)^l$ (l = Anzahl der Linien im Weg)

l (\equiv Länge des Weges) zu gewichten ist. Hier gibt es nur zwei Fälle: den Weg der Länge 0 und den Weg, der sich einmal um das Gitter windet (Länge L). Im thermodynamischen Limes tragen nur Wege bei, die sich nicht um das Gitter winden.

Dieses Verfahren, welches hier zunächst recht kompliziert erscheint, führt zu einer einfachen Darstellung für das Ising-Modell in beliebig vielen Dimensionen.

DER 1-DIMENSIONALE ANTI-FERROMAGNET

Im Ising-Modell werden Konfigurationen energetisch begünstigt, bei denen benachbarte Spins parallel sind. Es lassen sich jedoch auch Systeme denken, bei welchen anti-parallele Spins energetisch günstiger sind. Solche Systeme nennt man "Anti-Ferromagneten". Im Ising-Modell kann man diese Systeme auch dadurch realisieren, da man negative Temperaturen ($\beta < 0$) betrachtet. (Für Systeme mit endlich vielen lokalen Freiheitsgraden sind negative Temperaturen – d.h. Abnahme der Entropie bei Zunahme der Energie – möglich.)

Für das 1-dimensionale anti-ferromagnetische Ising-Modell sind die Eigenwerte der Transfermatrix:

$$\lambda_{\max} = 2 \cosh \beta \quad \lambda_{\min} = -2 \sinh \beta .$$

Dies ist ein Beispiel für ein System, bei welchem die Eigenwerte der Transfermatrix nicht positiv sind. Die freie Energie, durch den maximalen Eigenwert bestimmt, ist natürlich davon nicht betroffen. Allerdings folgt für die Korrelationsfunktion (siehe Übungsaufgaben):

$$G_k \equiv \langle s_i s_{i+k} \rangle = (-1)^k (\tanh \beta)^k ,$$

Die sogenannte 2-Punkt-Funktion ist also nicht mehr positiv sondern alternierend im Vorzeichen.

0.5 Das 2-dimensionale Ising-Modell

Das Modell wird zum ersten Mal in einer Arbeit von Lenz erwähnt [Z. Physik 21 (1920) 613], genauer untersucht hat es aber E. Ising 1925 in seiner Doktorarbeit [Z. Physik 31 (1925) 253]. 1936 gelang Peierls ein Beweis für die Existenz einer Phase mit spontaner Magnetisierung [Proc. Camb. Philos. Soc. 32 (1936) 477] und 1941 konnten Kramers und Wannier die Phasenübergangstemperatur für das 2-dimensionale Modell (ohne Magnetfeld) exakt berechnen [Phys. Rev. 60 (1941) 252]. 1944 fand Onsager die erste Lösung des 2-dimensionalen Ising-Modells mit algebraischen Methoden [Phys. Rev. 65 (1944) 117].

Ein älterer Review-Artikel über das Ising-Modell (nicht nur 2-dimensional) mit der Darstellung verschiedener Lösungsmethoden ist [G.F. Newell & E.W. Montroll; *On the Theory of the Ising Model of Ferromagnetism*; Rev. Mod. Phys. 25 (1953) 353]. Die Darstellung in dieser Vorlesung folgt im wesentlichen dem Buch von Feynman [R.P. Feynman; *Statistical Mechanics: A Set of Lectures*; Serie: Frontiers in Physics; W.A. Benjamin (1972)].

In diesem Abschnitt sollen im wesentlichen vier Aspekte des 2-dimensionalen Ising-Modells (ohne Magnetfeld) diskutiert werden: Die Hoch- und Tieftemperaturentwicklung zur näherungsweise Bestimmung der freien Energie, der Beweis für die Existenz eines Phasenübergangs, die Methode von Kramers und Wannier zur Bestimmung des Phasenübergangs, und schließlich die Methode von Feynman zur Berechnung der freien Energie mit Hilfe einer geschickten Summation über Wege auf einem quadratischen Gitter.

DIE HOCH- UND TIEFTEMPERATURENTWICKLUNG

Wie bei der Diskussion des 1-dimensionalen Ising-Modells benutzen wir die Relation

$$e^{\beta s_i s_j} = \cosh \beta + s_i s_j \sinh \beta = \cosh \beta (1 + s_i s_j \tanh \beta)$$

zu einer Umformung der Zustandssumme:


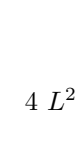


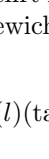
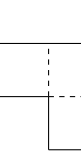

$$Z = (\cosh \beta)^{2L^2} \sum_{\{s_i \pm 1\}} \prod_{\langle i, j \rangle} (1 + s_i s_j \tanh \beta) .$$

($2L^2$ ist die Anzahl der Gitterlinien auf einem quadratischen $L \times L$ -Gitter.) Entwickelt man das Produkt so läßt sich wiederum jeder Term als eine bestimmte Markierung der Gitterlinien deuten: für jedes Paar benachbarter Spins ($s_i s_j$) wird die entsprechende Gitterlinie markiert. Bei der Summation über alle Spin-Orientierungen tragen nur solche Graphen bei, die geschlossenen Wegen entsprechen. Genauer sollte man von "Polygonzügen" sprechen, da jede Linie nur einmal besetzt werden kann und es nicht auf Orientierungen ankommt, wie ein Weg durchlaufen wird. Umgekehrt kann jeder geschlossene Polygonzug auch als Beitrag in dieser Summe interpretiert werden. Das Gewicht für einen Polygonzug ist $(\tanh \beta)^l$, wobei l seine Länge ist. Wir erhalten somit

$$Z = (\cosh \beta)^{2L^2} \sum_{\text{Polygonzüge}} (\tanh \beta)^l = (2 \cosh^2 \beta)^{L^2} \sum_l P(l) (\tanh \beta)^l . \quad (9)$$

$P(l)$ ist die Anzahl geschlossener Polygonzüge der Länge l . Diese Darstellung der Zustandssumme des Ising-Modells als Summation über geschlossene Polygonzüge gilt für beliebige Dimensionen. Sie gilt sogar für Formulierungen des Ising-Modells auf beliebigen Graphen.

Eine Entwicklung der Zustandssumme nach Potenzen von $\tanh \beta$ entspricht einer Hochtemperaturentwicklung. Die einfachsten geschlossenen Polygonzüge mit $l \leq 8$ zusammen mit ihren Multiplizitäten (für L genügend groß, hier $L \geq 4$) sind:

Länge	Anzahl	Gestalt	Länge	Anzahl	Gestalt
0	1		8	L^2	
4	L^2			$2 L^2$	
6	$2L^2$			$4 L^2$	
				$\frac{L^2(L^2 - 5)}{2}$	

Damit sind die ersten Terme der Zustandssumme, bzw. der freien Energie in der Hochtemperaturentwicklung:

$$\begin{aligned} Z &= (2 \cosh^2 \beta)^{L^2} \left(1 + L^2 (\tanh \beta)^4 + 2L^2 (\tanh \beta)^6 + L^2 \left(7 + \frac{1}{2}(L^2 - 5) \right) (\tanh \beta)^8 + \dots \right) \\ f &= - \lim_{L \rightarrow \infty} \frac{1}{\beta L^2} \ln Z \\ &= - \frac{1}{\beta} \left(\ln(2 \cosh^2 \beta) + (\tanh \beta)^4 + 2(\tanh \beta)^6 + \frac{9}{2} (\tanh \beta)^8 + \dots \right) \end{aligned} \quad (10)$$

Der nächste Schritt soll die Ableitung einer Tieftemperaturentwicklung ($\beta \rightarrow \infty$) sein. Dazu ziehen wir einen konfigurationsunabhängigen Faktor vor die Zustandssumme

$$Z = e^{2\beta L^2} \sum_{\{s_i = \pm 1\}} e^{\beta \sum_{\langle i,j \rangle} (s_i s_j - 1)} .$$

Das Gewicht einer Konfiguration wird nun bestimmt durch die Gitterlinien, welche zwei benachbarte Punkte mit entgegengesetzten Spin-Orientierungen verbinden: jede solche Linie trägt einen Faktor $e^{-2\beta}$ zum Gesamtgewicht bei. Für die folgenden Überlegungen ist es zweckmäßig, das sogenannte duale Gitter zu betrachten. Bei diesem sind die Rollen von Plaquetten und Vertices vertauscht, und zwei Vertices im dualen Gitter sind durch Linien verbunden, wenn die zugehörigen Plaquetten im ursprünglichen Gitter benachbart sind. Seien nun die Spin-Variable auf den Plaquetten des dualen Gitters, dann können wir Grenzlinien zwischen Gebieten mit Spin + und Spin - markieren. Diese Grenzlinien sind dual zu den Linien, welche in der Zustandssumme den Faktor $e^{-2\beta}$ beitragen. Jede Konfiguration von Spin-Orientierungen ergibt eine Konfiguration von Grenzlinien mit dem Gewicht $e^{-2\beta l}$, wobei l die Gesamtlänge der Grenzlinien in einer Konfiguration ist. Umgekehrt determiniert eine Konfiguration von Grenzlinien genau zwei Spinkonfiguration, die sich durch ein globales Vorzeichen unterscheiden.

Grenzlinien haben dieselben charakterisierenden Eigenschaften wie Polygonzüge: es ist keine Richtung ausgezeichnet, und jede Linie ist maximal einmal besetzt. Somit können wir für die Zustandssumme auch schreiben

$$Z = 2 e^{2\beta L^2} \sum_{\text{Polygonzüge}} e^{-2\beta l} .$$

Wiederum erhält man für das 2-dimensionale Ising-Modell eine Darstellung als Summation über Polygonzüge, allerdings mit einem Gewicht, welches für $\beta \rightarrow \infty$ verschwindet, d.h. wir haben eine Tieftemperaturentwicklung. Die ersten Terme in dieser Entwicklung ergeben für die freie Energie

$$-\beta f = 2\beta + e^{-8\beta} + 2e^{-12\beta} + \frac{9}{2}e^{-16\beta} + \dots \quad (11)$$

Diese Äquivalenz der Hoch- und Tieftemperaturentwicklung des 2-dimensionalen Ising-Modells auf einem quadratischen Gitter bezeichnet man auch als "Selbstdualität". Für allgemeine 2-dimensionale Gitter erhält man eine Darstellung des Ising-Modells durch Summation über Polygonzüge auf dem dualen Gitter. In mehr als 2 Dimensionen führt obige Argumentation zu Summationen über geschlossene Hyperflächen der Kodimension 1, in 3 Dimensionen also zur Summation über geschlossene Flächen, bei denen jede Plaquette nur maximal einmal belegt ist.

DER BEWEIS FÜR DIE EXISTENZ EINER PHASE MIT SPONTANER MAGNETISIERUNG

Das Ising-Modell hat in mehr als 2 Dimensionen einen Phasenübergang, welcher eine Phase mit spontaner Magnetisierung von einer Phase ohne spontane Magnetisierung trennt. Als Ordnungsparameter scheint sich zunächst der Erwartungswert der Spin-Orientierung anzubieten, allerdings ergibt sich das Problem, daß der Boltzmann-Faktor invariant unter der Ersetzung $s_i \rightarrow -s_i$ ist, und somit auf endlichen Gittern der Erwartungswert $\langle s_i \rangle$ immer verschwindet.

Es gibt mehrere Methoden, dieses Problem zu umgehen. Eine Möglichkeit ist die Einführung eines Magnetfeldes im Boltzmann-Faktor. Dadurch bricht man die Invarianz explizit, kann jedoch im thermodynamischen Limes das Magnetfeld 0 setzen. Eine andere, geeignetere Möglichkeit, die Magnetisierung zu definieren, ist:

$$\mu := \lim_{r \rightarrow \infty} \lim_{L \rightarrow \infty} \langle s_i s_{i+r} \rangle .$$

Man fragt also nach der Korrelation zwischen zwei “unendlich” weit voneinander entfernten Spins. Bei spontaner Magnetisierung ist die Wahrscheinlichkeit dafür, daß sie gleichgerichtet sind, größer als daß sie entgegengesetzt ausgerichtet sind, also ist $\mu > 0$. Bei verschwindender mittlerer Magnetisierung besteht keine Korrelation zwischen “unendlich” weit voneinander entfernten Spins, also ist $\mu = 0$.

Für $T = 0$ tragen zur Zustandssumme nur zwei Konfigurationen bei: alle Spins sind einheitlich $+1$ bzw. -1 . In beiden Fällen ist die Magnetisierung $\mu = 1$. Dies gilt aber auch für das 1-dimensionalen Ising-Modell, ohne daß dort eine Phase mit spontaner Magnetisierung existiert, da für beliebig kleine Temperaturen $T \neq 0$ die Magnetisierung verschwindet. Zu zeigen ist, daß es einen endlichen Temperaturbereich oberhalb von $T = 0$ gibt, in welchem die Magnetisierung von 0 verschieden ist. Der folgende Beweis ist typisch für Abschätzungen dieser Art in der statistischen Mechanik.

Wir formen zunächst die Definition von μ um:

$$\begin{aligned} \mu &= 2 \lim_{r \rightarrow \infty} \lim_{L \rightarrow \infty} \frac{1}{Z} \left(\sum_{\{s\}}^+ e^{\beta \sum_{\langle i,j \rangle} s_i s_j} - \sum_{\{s\}}^- e^{\beta \sum_{\langle i,j \rangle} s_i s_j} \right) \\ &= 2 \lim_{r \rightarrow \infty} \lim_{L \rightarrow \infty} \frac{e^{2\beta L^2}}{Z} \left(\sum_{\text{Polygonzüge}}^+ e^{-2\beta l} - \sum_{\text{Polygonzüge}}^- e^{-2\beta l} \right) \end{aligned}$$

Der Index $+$ bzw. $-$ an der Summe bedeutet, daß nur über Konfigurationen summiert wird, bei denen $s_r = 1$ und $s_0 = +1$ bzw. -1 festgehalten wird. Der Faktor 2 entsteht dadurch, daß die Konfigurationen mit $s_r = -1$ nicht extra gezählt werden. Wir stellen uns vor, daß der Spin bei $r \simeq$ “Unendlich” auf 1 festgehalten wird und fragen nach der Differenz der Beiträge der Konfigurationen, bei denen der Spin $s_0 = 1$ bzw. -1 ist.

Wir wollen nun die Beiträge der beiden Summen genauer untersuchen und zeigen, daß für genügend kleine Temperaturen (großes β) die zweite Summe ($s_0 = -1$) kleiner ist als die erste, und somit $\mu \neq 0$. Dazu benutzen wir die Formulierung der Zustandssummen als Summen über Bereichsgrenzen. Für den Beweis der Existenz einer Phase mit spontaner Magnetisierung interessiert nur eine grobe Abschätzung dieser Summe. Die entscheidende Beobachtung ist, daß wir für einen Beitrag zur zweiten Summe ($s_0 = -1$) mindestens eine Bereichsgrenze um den Spin bei 0 ziehen müssen, während dies für gleichgerichtete Spins ($s_0 = 1$) nicht notwendig ist.

Es gilt die folgende Ungleichung:

$$\sum_{\text{Polygonzüge}}^+ e^{-2\beta l} - \sum_{\text{Polygonzüge}}^- e^{-2\beta l} > \sum_{\text{Polygonzüge}}^+ e^{-2\beta l} \left(1 - 2 \sum_{\text{Polygonzug um 0}} e^{-2\beta l'} \right) \quad (12)$$

Die "Summation über einen Polygonzug um 0" bedeutet eine Summation über alle Polygonzüge, welche die 0 umschließen, einfach zusammenhängend sind und keine Selbstüberschneidungen oder Berührungen haben. Es gibt also nur ein Gebiet von $-$ Spins um die 0, ansonsten sind alle Spin-Orientierungen $+$.

In die Abschätzung (12) gehen zwei Beobachtungen ein: Jede Konfiguration aus der Summe über Bereichsgrenzen mit $s_0 = -1$ läßt sich aus einer solchen mit $s_0 = +1$ erhalten, indem man eine geeignete geschlossene Bereichsgrenze um 0 legt. Da es manchmal mehrere solche Möglichkeiten gibt, zählt man zu viele Konfigurationen zu $s_0 = -1$, was zu der Ungleichung führt. Außerdem läßt sich um eine $s_0 = +1$ Konfiguration nicht jede beliebige Bereichsgrenze um die 0 hinzufügen, was in obiger Ungleichung ebenfalls nur die rechte Seite verkleinert. Der Faktor 2 berücksichtigt, daß man die Bereichsgrenzen auch um den Punkt r hätte legen können.

Es bleibt zu zeigen, daß es einen Temperaturbereich für große β gibt, so daß

$$\frac{1}{2} > \sum_{\text{Polygonzug um 0}} e^{-2\beta l} .$$

Dazu benutzen wir folgende Abschätzungen:

Eine feste Bereichsgrenze um 0 der Länge l hat maximal einen Flächeninhalt von $(l/4)^2 = l^2/16$. Halten wir die Gestalt der Bereichsgrenze fest, so gibt es ihrem Flächeninhalt entsprechend viele Möglichkeiten, sie um die 0 zu legen. Die Anzahl der Formen von Bereichsgrenzen ist durch $4 \cdot 3^{l-1}$ beschränkt, da jede zusätzliche Linie – abgesehen vom ersten Schritt – nur in maximal 3 Richtungen gehen kann. Dies berücksichtigt nicht, daß Bereichsgrenzen geschlossene Wege sind, bzw. daß sich diese nicht selbst schneiden dürfen. Die Abschätzung ist also sicherlich sehr grob. Wir erhalten:

$$\frac{1}{2} > \sum_{l=4,6,8,\dots}^{\infty} \frac{l^2}{12} 3^l e^{-2\beta l} = \frac{x^2}{3(1-x)^3} (4 - 3x + x^2) \quad \text{mit} \quad x = 9e^{-4\beta} .$$

Man kann sich leicht überzeugen, daß die Ungleichung durch einen endlichen β -Bereich erfüllt ist. Damit ist bewiesen, daß es eine Phase mit spontaner Magnetisierung gibt.

Man erkennt auch den Unterschied zum 1-dimensionalen Ising-Modell. Dort kann man zwischen 0 und r genau r Umklappstellen zwischenfügen, deren relatives Gewicht immer $e^{-2\beta}$ ist. Für $r \rightarrow \infty$ wird aber r immer größer als der Boltzmannfaktor, egal wie groß β ist (Ausnahme: $\beta = \infty$ oder $T = 0$). In zwei Dimensionen werden große Bereichsgrenzen um 0 durch den Boltzmannfaktor unterdrückt, der jetzt von der Länge der Bereichsgrenze abhängt. ähnliche Argumente sind auch in mehr als zwei Dimensionen anwendbar, d.h. das Ising Modell besitzt immer eine Phase spontaner Magnetisierung für $d \geq 2$.

Zur Vervollständigung des Beweises für einen Phasenübergang im Ising-Modell ist noch zu zeigen, daß für genügen hohe Temperaturen die spontane Magnetisierung verschwindet. Die Hochtemperaturontwicklung für die Korrelationsfunktion zweier Spins

$$\langle s_i s_j \rangle = \frac{1}{Z} \sum_{\{s\}} s_i s_j e^{-\beta E}$$

besteht im Zähler aus allen Polygonzügen, von denen einer die Punkte i und j verbindet, während alle anderen geschlossen sind. Aus jedem Term in der Entwicklung von Z erhält man einen in der Entwicklung des Zählers, indem man eine (erlaubte) Verbindung von i nach j hinzunimmt, gewichtet

mit $(\tanh \beta)^l$, wobei l die Länge dieser Verbindung ist. "Erlaubt" heißt, daß dieser Verbindungsweg die vorhandenen Bereichsgrenzen nur so schneiden darf, daß an jedem Gitterpunkt nur zwei oder vier Linien zusammenkommen. Dies führt zu der Ungleichung

$$\langle s_i s_j \rangle < \sum_{\text{Wege } i \rightarrow j} (\tanh \beta)^l .$$

Für die Abschätzung aller Wege zwischen zwei Punkten gibt es bessere Formeln, hier können wir wieder die schon benutzte grobe Näherung anwenden:

$$\sum_{\text{Wege } i \rightarrow j} (\tanh \beta)^l < \frac{4}{3} \sum_{l > |i-j|} (3 \tanh \beta)^l = \frac{4}{3} \frac{x^{|i-j|}}{1-x} \quad \text{mit } x = 3 \tanh \beta .$$

($|i-j|$ ist die minimale Länge eines Verbindungsweges von i nach j .) Für genügend kleine Werte von β ist die Reihe konvergent ($\beta < 0.347$) und die Magnetisierung verschwindet.

DIE SELBSTDUALITÄT DES 2-DIMENSIONALEN ISING-MODELLS

Die bisherigen Überlegungen waren eigentlich kaum dimensionsspezifisch: Es gibt für $d \geq 2$ immer eine Phase mit spontaner Magnetisierung, die Hochtemperaturentwicklung ist immer eine Entwicklung nach Polygonzügen und die Tieftemperaturentwicklung immer eine Entwicklung nach Bereichsgrenzen. Das besondere an zwei Dimensionen ist, daß die Entwicklung nach Bereichsgrenzen ebenfalls eine Entwicklung nach Polygonzügen ist. Diese Eigenschaft erlaubt eine exakte Bestimmung der kritischen Temperatur nach einer Idee, die erstmals von Kramers und Wannier angewandt wurde.

Sei die duale Temperatur durch

$$e^{-2\beta^*} = \tanh \beta \quad \text{bzw.} \quad \beta^* = -\frac{1}{2} \ln(\tanh \beta) \quad (13)$$

definiert, so folgt aus

$$\begin{aligned} Z(\beta) &= 2 e^{2L^2\beta} \sum_{l=0}^{\infty} P(l) e^{-2\beta l} && \text{Tieftemperaturentwicklung} \\ Z(\beta) &= (2 \cosh^2 \beta)^{L^2} \sum_{l=0}^{\infty} P(l) (\tanh \beta)^l && \text{Hochtemperaturentwicklung} \end{aligned}$$

eine Beziehung zwischen $Z(\beta)$ und $Z(\beta^*)$:

$$Z(\beta) = \frac{(2 \cosh \beta \sinh \beta)^{L^2}}{2} Z(\beta^*) . \quad (14)$$

Kennen wir $Z(\beta)$, so können wir $Z(\beta^*)$ berechnen. Ist β groß, so ist β^* klein und umgekehrt. Die Beziehung verbindet also die Zustandssumme bei tiefen Temperaturen mit der Zustandssumme bei hohen Temperaturen. Wegen

$$\beta^{**} = -\frac{1}{2} \ln(\tanh \beta^*) = -\frac{1}{2} \ln[\tanh(-\frac{1}{2} \ln(\tanh \beta))] = \beta ,$$

führt diese Iteration nach zwei Schritten auf den ursprünglichen Wert zurück.

Ausgedrückt durch die freie Energie pro Gitterpunkt lautet obige Beziehung (14):

$$f(\beta) = \ln(\sinh 2\beta) + f(\beta^*) \quad .$$

Unter der Annahme, daß das Ising-Modell in zwei Dimensionen nur einen einzigen Phasenübergang hat, d.h. daß es nur einen Wert für β gibt, an welchem die freie Energie pro Gitterpunkt nicht-analytisch ist, kann dieser Punkt nur der Fixpunkt der Dualitätstransformation $\beta \rightarrow \beta^*$ sein. (Gäbe es zwei Phasenübergänge, so würden die entsprechenden kritischen Temperaturen durch diese Transformation ineinander überführt.) Die Lösung der Gleichung

$$e^{-2\beta} = \frac{1 - e^{-2\beta}}{1 + e^{-2\beta}}$$

ergibt als Wert für die Temperatur des Phasenübergangs:

$$\beta_c = \frac{1}{2} \ln(1 + \sqrt{2}) \approx 0.440687$$

LÖSUNG DES 2-DIMENSIONALEN ISING-MODELLS

Als "Vorübung" soll zunächst die Summation über alle geschlossenen, unorientierten Wege auf einem quadratischen Gitter berechnet werden. Eine Methode ist z.B. die folgende:

Wir betrachten zunächst alle Wege der Länge l (mit einer Zusammenhangskomponente) auf dem Gitter, die bei 0 beginnen und enden. Für die Anzahl $P(l)$ dieser Wege gibt es eine einfache Integraldarstellung:

$$P(l) = \frac{1}{(2\pi)^2} \int_{-\pi}^{\pi} dk_1 \int_{-\pi}^{\pi} dk_2 \left(e^{ik_1} + e^{-ik_1} + e^{ik_2} + e^{-ik_2} \right)^l \quad . \quad (15)$$

Im Hinblick auf spätere Überlegungen soll diese Formel detaillierter abgeleitet werden. Sei

$$\tilde{P}(l; k_1, k_2) = \sum_{n,m} P(l; n, m) e^{ink_1 + imk_2}$$

die erzeugende Funktion für die Anzahl $P(l; n, m)$ der Wege vom Ursprung des Gitters zu einem Punkt (n, m) . Diese erzeugende Funktion erfüllt die Rekursionsformel

$$\tilde{P}(l; k_1, k_2) = \left(e^{ik_1} + e^{-ik_1} + e^{ik_2} + e^{-ik_2} \right) \tilde{P}(l-1, k_1, k_2) \quad , \quad (16)$$

d.h. die Fouriertransformierte der Bedingung

$$P(l; n, m) = P(l-1; n-1, m) + P(l-1; n+1, m) + P(l-1; n, m-1) + P(l-1; n, m+1) \quad ,$$

die anschaulich beschreibt, daß die Anzahl der Wege der Länge l zum Punkt (n, m) gleich der Summe der Anzahl der Wege der Länge $l-1$ zu den Nachbarn von (n, m) ist. Die Rekursionsformel (16) hat die offensichtliche Lösung

$$\tilde{P}(l; k_1, k_2) = \left(e^{ik_1} + e^{-ik_1} + e^{ik_2} + e^{-ik_2} \right)^l \quad .$$

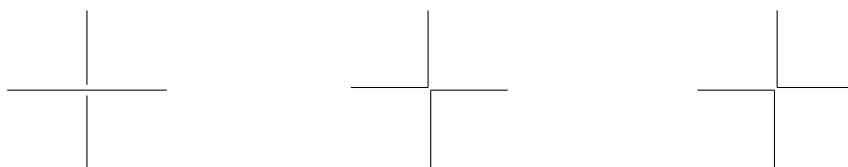
Die Integration über k_i in Gl.15 projiziert aus der generierenden Funktion den Anteil $P(l; 0, 0)$ heraus, d.h. die Anzahl der geschlossenen Wege der Länge l .

Will man über alle geschlossenen Wege summieren, so kann man den Punkt 0 über das Gitter verschieben, jeder Weg tritt also L^2 mal auf. Andererseits kann jeder Punkt eines geschlossenen Weges als Anfangspunkt gewählt werden, ein gegebener Weg wird also l -mal überzählt. Da über unorientierte Wege summiert werden soll, fügen wir noch einen Faktor $1/2$ ein. Somit erhalten wir für die Summation über alle geschlossenen, unorientierten Wege (gewichtet mit einem Faktor x^l):

$$\begin{aligned} Z_1 &= \frac{L^2}{2} \frac{1}{(2\pi)^2} \int_{-\pi}^{\pi} dk_1 \int_{-\pi}^{\pi} dk_2 \sum_l \frac{1}{l} \left(e^{ik_1} + e^{-ik_1} + e^{ik_2} + e^{-ik_2} \right)^l x^l \\ &= -\frac{L^2}{2} \frac{1}{(2\pi)^2} \int_{-\pi}^{\pi} dk_1 \int_{-\pi}^{\pi} dk_2 \ln[1 - 2(\cos k_1 + \cos k_2)x] \quad . \end{aligned} \quad (17)$$

Eigentlich müßte man zur Berechnung der Zustandssumme noch über Zusammenhangskomponenten summieren, was aber einer Exponentierung von Z_1 entspricht. Das Ergebnis ist also die gesamte freie Energie eines solchen Systems.

Für die Berechnung der Zustandssumme bzw. der freien Energie des Ising-Modells hat man über Polygonzüge zu summieren, die sich in zweierlei Hinsicht von unorientierten Wegen unterscheiden: Es gibt Wege, die einzelne Linien des Gitters mehrmals durchlaufen und somit keine Polygonzüge sind. Außerdem gibt es Wege, die denselben Polygonzug definieren. Dies geschieht immer dann, wenn sich Wege schneiden. An solchen Schnittpunkten gibt es mehrere Möglichkeiten für die relative Orientierung bzw. den Durchlauf des Weges.



(Fig. 1)

Man hat also obige Summation einzuschränken auf solche Wege, die auch gleichzeitig Polygonzüge sind. Außerdem möchte man das Überzählen von Polygonzügen vermeiden, indem man bei Wegen mit Selbstüberschneidung nur eine Orientierung herausgreift.

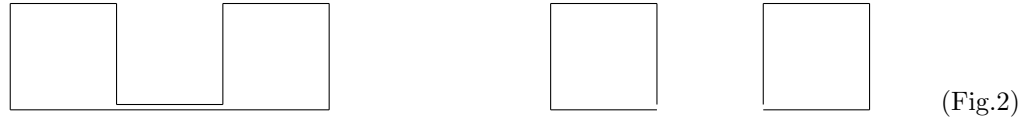
Die entscheidende Idee zur Lösung dieses Problems geht auf eine Vermutung von Feynman zurück (basierend auf Ideen von Kac und Ward), die später von S. Sherman bewiesen wurde [J. Math. Phys. 1 (1960) 202; 4 (1963) 1213]. Feynmans Conjecture war folgende: Gewichtet man in einer Summation über Wege (auch mit mehreren Zusammenhangskomponenten) jeden Weg mit einem Faktor $(-1)^\Omega$, wobei Ω die Anzahl der Selbstüberschneidungen der Wege ist, so entspricht dies einer Summation über alle Polygonzüge. Außerdem hat man noch explizit Wege mit "Spikes" auszuschließen, also solche bei denen der Weg an einer Stelle direkt zurückgeht. Die Behauptung ist, daß sich durch die "Gewichtung" mit negativen Faktoren die unerwünschten oder überzähligen Wege gerade wegheben:

$$\sum_{\text{Wege ohne Spikes}} (-1)^\Omega x^l = \sum_{\text{Polygonzüge}} x^l \quad .$$

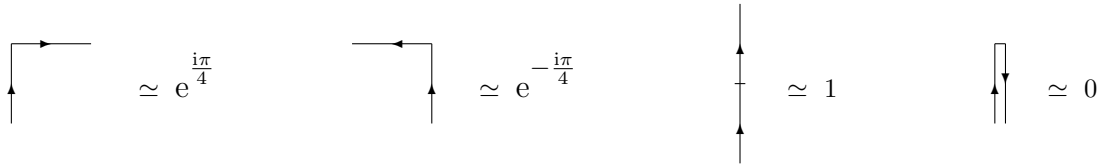
Der vollständige Beweis dieser Vermutung benutzt aufwendige Kombinatorik. Die Richtigkeit soll hier nur an einigen Beispielen plausibel gemacht werden.

Angenommen 4 Linien eines Polygonzuges treffen an einem Punkt zusammen, dann gibt es drei verschiedene (unorientierte) Wege, die denselben Polygonzug definieren (Fig. 1). Zwei Wege sind ohne Überschneidungen, ein Weg hat eine Überschneidung. Summiert man über diese drei Möglichkeiten mit der entsprechenden Gewichtung, so bleibt nur ein Weg übrig.

Ein anderes Beispiel ist ein Weg, der eine Linie zweimal belegt. Auch hier erkennt man, daß eine Möglichkeit eine Überschneidung hat, die andere jedoch nicht, so daß sich die beiden (unerwünschten) Wege wegheben. Beispiel:



Die zweite Idee (zurückgehend auf Kac und Ward) besteht darin, daß sich der Faktor $(-1)^\Omega$ – der zunächst als eine globale topologische Größe erscheint – durch das Produkt lokaler Beiträge an einem Weg erhalten läßt. Dazu wählen wir folgende Konvention: Macht ein Weg an einem Punkt einen Knick nach rechts, so erhält er einen Faktor $\omega_R = \exp(\frac{i\pi}{4})$, macht er einen Knick nach links, so bekommt er einen Faktor $\omega_L = \exp(-\frac{i\pi}{4})$. Läuft er gerad aus, so ist das ‘Gewicht’ $\omega_1 = 1$, geht er zurück, so erhält er das Gewicht $\omega_0 = 0$:



Diese lokalen Gewichte schließen explizit Wege mit Spikes aus. Die Behauptung ist jedoch, daß das Produkt dieser Gewichte entlang eines Weges im wesentlichen die Anzahl der Selbstüberschneidungen ergibt, genauer:

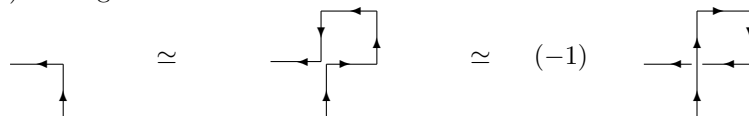
$$\prod_{\text{Vertizes } i \text{ entlang des Weges}} \omega_i = (-1)^{\Omega+n} . \tag{18}$$

Hierbei ist n die Anzahl der Zusammenhangskomponenten des Weges. Auch dieses Theorem soll nur an einigen Beispielen plausibel gemacht werden.

Zunächst überzeugt man sich, daß ein einfacher Weg um ein Quadrat das Gewicht (-1) erhält, in Einklang mit der Formel. Entsprechend haben n unzusammenhängende Quadrate einen Faktor $(-1)^n$. Außerdem ist der Faktor invariant unter lokalen Veränderungen des Weges, die nicht zu Überschneidungen führen oder Überschneidungen entfernen, z.B.:



Schließlich zeigt man noch, daß eine Überschneidung bei einem einzelnen angehängten Quadrat einen Faktor (-1) beiträgt:



Es bleibt das Problem, eine Summation über alle Wege auszuführen, wobei jeder Weg mit einem Produkt von Faktoren "gewichtet" wird, die sich lokal aus den Knicken des Weges ergeben. Dies soll in Analogie zu der Summation über alle Wege zu Beginn dieses Abschnitts geschehen. Der erste Schritt besteht darin, eine geeignete erzeugende Funktion für Wege der Länge l (mit den komplexen Gewichten) zu finden. Da die Gewichte nun von den Richtungsänderungen des Weges abhängen, bietet es sich an, eine Funktion

$$\tilde{P}_{\alpha\beta}(l; k_1, k_2) = \sum_{n,m} P_{\alpha\beta}(l; n, m) e^{ink_1 + imk_2}$$

zu suchen, wobei sich die Indizes α, β auf die vier möglichen Richtungen zu Beginn bzw. am Ende des Weges beziehen. Wählen wir die Konvention

$$1 \simeq \uparrow \quad 2 \simeq \downarrow \quad 3 \simeq \rightarrow \quad 4 \simeq \leftarrow$$

so ist z.B. $P_{13}(l; n, m)$ gleich der Summe über alle Wege vom Ursprung des Gitters zum Punkt (n, m) die in Richtung " \uparrow " beginnen (d.h. der erste Schritt ist in Richtung $(0,1)$) und nach dem letzten Schritt in Richtung " \rightarrow " zeigen (d.h. der nächste Schritt müßte zum Punkt $(n+1, m)$ gehen). Außerdem enthält $P_{\alpha\beta}(l)$ die Produkte der Phasenfaktoren für die Richtungsänderungen des Weges.

$\tilde{P}_{\alpha\beta}(l)$ erfüllt wieder eine Rekursionsformel (in Analogie zu Gl.16) und läßt sich als l -te Potenz der Matrix $\tilde{P} = \tilde{P}_{\alpha\beta}(1)$ schreiben, welche durch

$$\tilde{P}(k_1, k_2) = \begin{pmatrix} e^{ik_2} & 0 & e^{ik_2\omega} & e^{ik_2\omega^{-1}} \\ 0 & e^{-ik_2} & e^{-ik_2\omega^{-1}} & e^{-ik_2\omega} \\ e^{ik_1\omega^{-1}} & e^{ik_1\omega} & e^{ik_1} & 0 \\ e^{-ik_1\omega} & e^{-ik_1\omega^{-1}} & 0 & e^{-ik_1} \end{pmatrix} \quad \text{mit } \omega = e^{\frac{i\pi}{4}}$$

gegeben ist. Die Matrixelemente lassen sich folgendermaßen interpretieren: jeder Schritt nach oben (unten, rechts, links) erhält einen Faktor $e^{ik_2}(e^{-ik_2}, e^{ik_1}, e^{-ik_1})$, dies entspricht der Konvention, die auch zu Beginn dieses Kapitels gewählt wurde (Gl.16). Außerdem enthält $\tilde{P}_{\alpha\beta}$ noch die lokalen "Gewichte": 0 für Paare (α, β) , die entgegengesetzten Richtungen entsprechen, 1 auf der Diagonalen (d.h. der Weg geht geradeaus) und einen Faktor ω bzw. ω^{-1} für einen Rechts- bzw. Linksknick des Weges.

Mit Hilfe der Matrix $\tilde{P}(k_1, k_2)$ läßt sich die Summe über alle geschlossenen Wege der Länge l leicht bestimmen:

$$P(l) = \frac{1}{(2\pi)^2} \int_{-\pi}^{\pi} dk_1 \int_{-\pi}^{\pi} dk_2 \operatorname{tr} \tilde{P}^l(k_1, k_2) \quad .$$

Dabei bewirkt die Integration über k_1, k_2 wieder eine Projektion auf die Wege, welche zum Ursprung zurückkehren. Die Spur gibt an, daß für einen geschlossenen Weg die Richtung, in welcher der Weg nach dem l -ten Schritt zeigt, gleich der Anfangsrichtung sein muß. Anschließend wird über die vier möglichen Anfangsrichtungen summiert.

Die verbleibende Rechnung folgt direkt dem Beispiel der Summation über Wege. Wir wollen die freie Energie des Systems bestimmen, daher summieren wir nur über Wege mit einer Zusammenhangskomponente, geben aber jedem Weg einen Faktor (-1) (dies führt in der Zustandssumme zu einem Faktor $(-1)^n$ wie oben (Gl.18) diskutiert). Außerdem erhält jeder Weg einen Faktor $1/2$, da

er in zwei Richtungen durchlaufen werden kann, sowie einen Faktor $1/l$, da jeder Punkt des Weges Ursprungspunkt sein kann. Sei

$$q = \frac{1}{L^2} \ln \left(\sum_{\text{Polygonzüge}} (\tanh \beta)^l \right)$$

so erhalten wir:

$$\begin{aligned} q &= -\frac{1}{2} \frac{1}{(2\pi)^2} \int_{-\pi}^{\pi} dk_1 \int_{-\pi}^{\pi} dk_2 \operatorname{tr} \sum_l \frac{1}{l} \tilde{P}(l; k_1, k_2) (\tanh \beta)^l \\ &= \frac{1}{2} \frac{1}{(2\pi)^2} \int_{-\pi}^{\pi} dk_1 \int_{-\pi}^{\pi} dk_2 \operatorname{tr} \ln [1 - \tilde{P}(k_1, k_2) \tanh \beta] \\ &= \frac{1}{2} \frac{1}{(2\pi)^2} \int_{-\pi}^{\pi} dk_1 \int_{-\pi}^{\pi} dk_2 \ln \det [1 - \tilde{P}(k_1, k_2) \tanh \beta] \end{aligned}$$

Man vergleiche diese Formel mit der entsprechenden Formel (17) für die Summation über alle Wege. Berechnet man die Determinante und setzt die Formeln des letzten Abschnitts ein so ergibt sich für die freie Energie:

$$f = -\frac{1}{\beta} \left(\ln 2 + \frac{1}{2} \frac{1}{(2\pi)^2} \int_{-\pi}^{\pi} dk_1 \int_{-\pi}^{\pi} dk_2 \ln [\cosh^2 2\beta - \sinh 2\beta (\cos k_1 + \cos k_2)] \right) . \quad (19)$$

Aus der freien Energie erhalten wir durch differenzieren nach β die innere Energie bzw. in der zweiten Ableitung die spezifische Wärme

$$E = \frac{\partial}{\partial \beta} (-\beta f) \quad c_V = \frac{\partial}{\partial T} E .$$

Die spezifische Wärme hat im 2-dimensionalen Ising-Modell eine logarithmische Singularität bei T_c , d.h. in der Nähe des kritischen Punktes gilt $c_V \propto -\ln |T - T_c|$. Der Phasenübergang ist nach der allgemeinen Klassifikation also 2. Ordnung.

In der folgenden Abbildung ist die innere Energie als Funktion von β dargestellt (berechnet aus Gl.19 durch Approximation der Integrale durch eine Summe – entsprechend einem Ising-Modell auf einem 1000×1000 Gitter). Man erkennt eine verstärkte Temperaturabhängigkeit in der Nähe des kritischen Punktes $\beta_c \approx 0.44$. Zum Vergleich ist auch die Hoch- bzw. Tieftemperaturentwicklung für die innere Energie angegeben bis zu der Ordnung, die wir im ersten Abschnitt dieses Kapitels berechnet haben (Gl.10,11). Mit Ausnahme eines kleinen Bereiches um den kritischen Punkt ($0.4 < \beta < 0.5$) geben diese Näherungsverfahren das Verhalten der inneren Energie bereits ausgezeichnet wieder.

0.6 Quanten-Spinketten

Über den Transfermatrix-Formalismus sind d -dimensionale Gittertheorien mit klassischen lokalen Freiheitsgraden verknüpft mit einem Operatorformalismus zu einer $d-1$ -dimensionalen Gittertheorie. Oft sind Hamilton-Operatoren zu $d-1$ -dimensionalen Spin-Systemen äquivalent mit klassischen Gittersystemen. Beispiele dafür werden wir später im Zusammenhang mit Vertex-Modellen noch besprechen.

Nach der Ableitung der Transfermatrix für das 2-dimensionale Ising-Modell soll ein formaler Kontinuumsliches für die "Zeit"-Richtung vorgenommen werden, der zu einem nicht-trivialen Hamilton-Operator führt und dessen Eigenschaften eng mit dem Ising-Modell verknüpft sind. Der dritte Abschnitt enthält eine Liste bekannter Modelle für Quanten-Spinketten.

DIE TRANSFERMATRIX DES 2-DIMENSIONALEN ISING-MODELLS

Wir betrachten das 2-dimensionale Ising-Modell auf einem $N \times M$ Gitter mit periodischen Randbedingungen. Die Kopplungen auf "raum-artigen" und "zeit-artigen" Gitterlinien werden zunächst als verschieden angenommen, d.h. der Boltzmann-Faktor ist

$$\hat{p}[\{s\}] = e^{\beta_t \sum_{m,n} s(m,n)s(m+1,n) + \beta_x \sum_{m,n} s(m,n)s(m,n+1)} .$$

Der 2^N dimensionale Vektorraum der raumartigen Konfigurationen hat die Konfigurationsraumbasis

$$|\{s\}\rangle = |s_1, s_2, \dots, s_N\rangle = |s_1\rangle \otimes \dots \otimes |s_N\rangle \quad s_i = \pm 1 .$$

Wir setzen

$$|+\rangle \cong \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \quad \text{und} \quad |-\rangle \cong \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} .$$

In diesem Vektorraum definieren wir die Matrizen

$$\begin{aligned} \Sigma_3(n) &= \mathbb{1} \otimes \mathbb{1} \otimes \dots \otimes \sigma_3 \otimes \dots \otimes \mathbb{1} \\ \Sigma_1(n) &= \mathbb{1} \otimes \mathbb{1} \otimes \dots \otimes \sigma_1 \otimes \dots \otimes \mathbb{1} . \end{aligned} \quad (20)$$

Dabei sind

$$\sigma_3 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \quad \text{und} \quad \sigma_1 = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$$

die Pauli-Matrizen, die an der n .ten Stelle im Tensorprodukt stehen. $\Sigma_3(n)$ und $\Sigma_1(n)$ erfüllen die Vertauschungsrelationen:

$$[\Sigma_3(m), \Sigma_1(n)] = [\Sigma_3(m), \Sigma_3(n)] = [\Sigma_1(m), \Sigma_1(n)] = 0 \quad \text{für } m \neq n \quad (21)$$

$$\text{und} \quad \{\Sigma_3(m), \Sigma_1(m)\} \equiv \Sigma_3(m)\Sigma_1(m) + \Sigma_1(m)\Sigma_3(m) = 0 . \quad (22)$$

Diese Matrizen generieren die Algebra aller $2^N \times 2^N$ -Matrizen.

Die Matrixelemente der Transfermatrix in der Konfigurationsraumbasis sind

$$\langle \{s'\} | T | \{s\} \rangle = \exp \left(\beta_t \sum_n s(n)s'(n) + \frac{1}{2} \beta_x \sum_n (s(n)s(n+1) + s'(n)s'(n+1)) \right) .$$

Wir wollen nun die Transfermatrix durch die Operatoren $\Sigma_3(n)$ und $\Sigma_1(n)$ ausdrücken. Dazu benutzen wir, daß $\Sigma_3(n)$ in der Konfigurationsraumbasis diagonal ist, d.h. es gilt

$$\exp \left(\frac{1}{2} \beta_x \sum_n \Sigma_3(n)\Sigma_3(n+1) \right) |s_1, \dots, s_N\rangle = \exp \left(\frac{1}{2} \beta_x \sum_n s(n)s(n+1) \right) |s_1, \dots, s_N\rangle ,$$

entsprechend für $\{s'(n)\}$. Für den nicht-diagonalen Anteil betrachten wir zunächst die Transfermatrix des 1-dimensionalen Ising-Modells

$$T_1 = e^{\beta_t} \mathbb{1} + e^{-\beta_t} \sigma_1 = e^{\beta_t} \left(\mathbb{1} + e^{-2\beta_t} \sigma_1 \right) .$$

Andererseits gilt

$$e^{\beta_t^* \sigma_1} = \cosh \beta_t^* + \sigma_1 \sinh \beta_t^* = \cosh \beta_t^* (\mathbb{1} + \tanh \beta_t^* \sigma_1) .$$

Mit der dualen Temperatur β^* (siehe Gl. 12)

$$\tanh \beta^* = e^{-2\beta} \quad \text{bzw.} \quad \beta^* = \frac{1}{2} \ln \tanh \beta \quad (23)$$

folgt

$$T_1 = e^{\beta_t} (\cosh \beta_t^*)^{-1} e^{\beta_t^* \sigma_1} = \sqrt{2 \sinh 2\beta} e^{\beta_t^* \sigma_1} .$$

Der gemischte Anteil der Transfermatrix des 2-dimensionalen Ising-Modells ist das N -fache Tensorprodukt dieser Matrix. Da außerdem die $\Sigma_1(n)$'s an verschiedenen Punkten kommutieren, erhalten wir

$$T = (2 \sinh 2\beta_t)^{N/2} V_1^{1/2} V_2 V_1^{1/2} \quad (24)$$

mit

$$V_1 = e^{\beta_t^* \sum_n \Sigma_1(n)} \quad \text{und} \quad V_2 = e^{\beta_x \sum_n \Sigma_3(n) \Sigma_3(n+1)} . \quad (25)$$

DAS QUANTEN-ISING-MODELL

Wir wollen nun die Parameter β_x und β_t^* geeignet gegen 0 gehen lassen, das Verhältnis jedoch festhalten. (Der kritische Punkt des Ising-Modells wird für $\beta_x = \beta_t^*$ angenommen.) Bei Reskalierung $\beta_x \rightarrow \epsilon \beta_x$ und $\beta_t^* \rightarrow \epsilon \beta_t^*$ verhält sich die Transfermatrix für $\epsilon \rightarrow 0$ wie

$$\begin{aligned} e^{\frac{1}{2} \epsilon \beta_x \sum_n \Sigma_3(n) \Sigma_3(n+1)} e^{\epsilon \beta_t^* \sum_n \Sigma_1(n)} e^{\frac{1}{2} \epsilon \beta_x \sum_n \Sigma_3(n) \Sigma_3(n+1)} \\ \simeq e^{\epsilon (\beta_t^* \sum_n \Sigma_1(n) + \beta_x \sum_n \Sigma_3(n) \Sigma_3(n+1))} \end{aligned}$$

Diese Relation legt nahe, die Matrix

$$H = - \sum_n \Sigma_1(n) + \lambda \Sigma_3(n) \Sigma_3(n+1) \quad (26)$$

zu untersuchen. Diese Matrix ist der Hamilton-Operator zum sogenannten (1-dimensionalen) Quanten-Ising-System. Er beschreibt eine 1-dimensionale Kette von Quanten-Spins mit einem Potential, welches gleichgerichtete Spin-Orientierungen in der Kette bevorzugt, und einem "kinetischen" Anteil, welcher die Spin-Orientierung umzuklappen versucht.

Das System zum Hamilton-Operator (26) hat viele Eigenschaften mit dem Ising-Modell gemein. Insbesondere erlaubt es eine Dualitätstransformation. Dazu definieren wir die Matrizen

$$\begin{aligned} \mu_1(n) &= \Sigma_3(n) \Sigma_3(n+1) \\ \text{und} \quad \mu_3(n) &= \prod_{m \leq n} \Sigma_1(m) = \sigma_1 \otimes \cdots \otimes \sigma_1 \otimes \mathbb{1} \otimes \mathbb{1} \cdots . \end{aligned}$$

Die Randterme erfordern eine gesonderte Behandlung. Wir definieren:

$$\Sigma_3(N+1) = \mathbb{1} \quad \text{und somit} \quad \mu_1(N) = \Sigma_3(N) .$$

Der entsprechende Term ist auch im Hamilton-Operator einzusetzen. Dies weicht etwas ab von den üblichen periodischen Randbedingungen, vereinfacht das Problem für die Dualitätstransformation jedoch.

Offensichtlich gilt

$$\mu_3(n-1)\mu_3(n) = \Sigma_1(n) \quad (\mu_3(0) = \mathbb{1}) ,$$

und somit folgt für den Hamilton-Operator

$$H = - \sum_n (\mu_3(n-1)\mu_3(n) + \lambda\mu_1(n)) = - \lambda \sum_n (\mu_1(n) + \lambda^{-1}\mu_3(n-1)\mu_3(n)) ,$$

(wobei wieder die Besonderheit des Randterms zu berücksichtigen ist). Soweit ist dies nur eine Umformung des Hamilton-Operators. Man kann sich jedoch leicht überzeugen, daß die Algebra der neuen Matrizen $\mu_i(n)$ gleich der Algebra der Matrizen $\Sigma_i(n)$ ist:

$$\mu_i(n)^2 = \mathbb{1} \quad [\mu_i(n), \mu_j(m)] = 0 \quad (\text{für } m \neq n) \quad \mu_1(n)\mu_3(n) + \mu_3(n)\mu_1(n) = 0 .$$

Hierdurch ist das Spektrum von H festgelegt, $H(\lambda)$ und $\lambda H(\lambda^{-1})$ sind unitär äquivalent. Der Fixpunkt $\lambda = 1$ ist der Selbstdualitätspunkt des 2-dimensionalen Ising-Modells.

DIE XYZ QUANTEN-SPIN-KETTE

Die bekannteste Quanten-Spin-Kette ist das XYZ-Modell

$$H = -\frac{1}{2} \sum_n J_x \Sigma_1(n) \Sigma_1(n+1) + J_y \Sigma_2(n) \Sigma_2(n+1) + J_z \Sigma_3(n) \Sigma_3(n+1) . \quad (27)$$

Σ_i sind dabei definiert wie in Gl.42, wobei allerdings die Pauli-Matrizen durch eine beliebige Darstellung der Generatoren der Drehgruppe ersetzt werden können. Entsprechend hat man für die Spin $\frac{n}{2}$ -Darstellung einen $n+1$ -dimensionalen Darstellungsraum an jedem Gitterpunkt. Die folgenden konkreten Beispiele beziehen sich immer auf die Spin $1/2$ Darstellung. Ganz allgemein lassen sich natürlich sowohl lineare Terme in Σ_i als auch höhere Kopplungen addieren.

Die Nomenklatur "XYZ-Modell" bezieht sich auf die Wahl der Kopplungskonstanten J_x, J_y, J_z . Das Modell (27) ist äquivalent zum sogenannten 8-Vertex-Modell (siehe später), welches von Baxter gelöst wurde. Sämtliche Eigenvektoren sowie der minimale Eigenwert sind bekannt. Für die anderen Eigenwerte lassen sich im allgemeinen nur (gekoppelte) Integralgleichungen angeben.

Viele integrable statistische Modelle in 2 Dimensionen (bzw. Quanten-Spin-Ketten in einer Dimension) hängen eng mit Spezialfällen dieses Modells zusammen. Betrachten wir den Beitrag zum Hamilton-Operator für zwei benachbarte Spins (Spin $\frac{1}{2}$ -Darstellung), so gilt

$$J_x \Sigma_1(n) \Sigma_1(n+1) + J_y \Sigma_2(n) \Sigma_2(n+1) + J_z \Sigma_3(n) \Sigma_3(n+1) \\ \simeq \begin{pmatrix} J_z & 0 & 0 & J_x - J_y \\ 0 & -J_z & J_x + J_y & 0 \\ 0 & J_x + J_y & -J_z & 0 \\ J_x - J_y & 0 & 0 & J_z \end{pmatrix}$$

(Basis ($\uparrow\uparrow, \uparrow\downarrow, \downarrow\uparrow, \downarrow\downarrow$)). Die physikalische Bedeutung dieser Matrix läßt sich folgendermaßen interpretieren: J_z ist eine Kopplung zu einem Term, der die Spin-Orientierung "mißt", wobei für $J_z > 0$ gleichgerichtete Spins bevorzugt sind. $J_x + J_y$ "flippt" Spins, sofern sie verschiedene Orientierung haben, $J_x - J_y$ beschreibt eine Kopplung, welche gleichgerichtete Spins "flippt".

Je nach Spezialfällen für die Kopplungen unterscheidet man verschiedene Modelle:

1. $J_x = J_y$: das "XXZ-Modell"

Das XXZ-Modell ist äquivalent zum 6-Vertex-Modell. Es wird manchmal auch das "Heisenberg-Ising-Modell" genannt. Die Eigenvektoren zu diesem Operator wurden 1931 von Bethe gefunden [Z. Physik 71 (1931) 205], 1966 berechneten C.N. Yang und C.P. Yang den minimalen Eigenwert für die unendliche Kette [Phys. Rev. 150 (1966) 321 u. 327; Phys. Rev. 151 (1966) 258]. Das 6-Vertex-Modell und den Bethe-Ansatz werden wir später noch besprechen. Da in diesem Modell nur benachbarte Spins "geflippt" werden sofern sie verschiedene Orientierung haben, bleibt die Gesamtzahl der + bzw. - Spins erhalten.

2. $J_x = J_y = J_z$: das "XXX-Modell"

Dieses Modell wurde ursprünglich von Heisenberg als Modell für den Ferromagnetismus untersucht [Z. Physik 49 (1928) 619] und wird daher auch Heisenberg-Spin-Kette genannt.

3. $J_y = 0$: das XY-Modell

Von diesem Modell kann gezeigt werden, daß es äquivalent zum 2-dimensionalen Ising-Modell ist (d.h. die Transfermatrix des Ising-Modells und die XY -Spin-Kette haben die selben Eigenvektoren) [E.H. Lieb, T.D. Schultz, D.C. Mattis; Ann. Phys. 16 (1961) 407; S. Katsura; Phys. Rev. 127 (1962) 1508].

0.7 Zweidimensionale reine Gittereichtheorien

Gittereichtheorien sind insbesondere im Zusammenhang mit Gittermodellen für Elementarteilchentheorien von Bedeutung. Im folgenden schränken wir uns auf die reinen Eichtheorien ein, ohne sogenannte "Materiefelder" auf den Gitterpunkten. Allgemein sind reine Eichtheorien durch folgende Vorschriften definiert: Die lokalen Freiheitsgrade sind den (gerichteten) Gitterlinien zugeordnet (d.h. geordneten Paaren benachbarter Punkte) und sind Elemente einer $N \times N$ -Matrixdarstellung einer (kompakten) Gruppe. Sei g_l das Gruppenelement an der Gitterlinie $l = \langle i, i' \rangle$. Drehen wir die Orientierung von l um, so soll gelten:

$$g_{\langle i, i' \rangle} = g_{\langle i', i \rangle}^{-1} .$$

Die Energie einer Konfiguration ist

$$E[\{g_l\}] = -\frac{1}{2N} \sum_{\langle l_1, l_2, l_3, l_4 \rangle} \text{tr} (g_{l_1} g_{l_2} g_{l_3} g_{l_4} + \text{h.c.} - 2) .$$

Hierbei bilden $(l_1, l_2, l_3, l_4) = (\langle i_1, i_2 \rangle, \langle i_2, i_3 \rangle, \langle i_3, i_4 \rangle, \langle i_4, i_1 \rangle)$ die vier (orientierten) Gitterlinien um eine Plakette, die Summation ist über alle Plaketten in einem Gitter zu führen ("h.c." steht für "hermitean conjugate", d.h. der hermitesch konjugierte Term ist für eine reelle Energie zu addieren). Die Wechselwirkung ist also bestimmt durch die vier Freiheitsgrade auf den Linien um eine Plakette. Solch eine Theorie heißt Eichtheorie, weil sie invariant unter den lokalen Transformationen

$$g_{\langle i, j \rangle} \rightarrow \hat{g}_i g_{\langle i, j \rangle} \hat{g}_j^{-1}$$

ist, wobei $\{\hat{g}\}$ eine beliebige Konfiguration von Gruppenelementen auf den Gitterpunkten ist.

Für die Zustandssumme ist über die Freiheitsgrade zu summieren. Für endliche Gruppe ist dies kein Problem. Für kompakte Lie-Gruppen existiert jedoch immer ein eindeutiges, normiertes, biinvariantes Maß dg :

$$\int dg = 1 \quad , \quad \int dg f(g) = \int dg f(g'g) = \int dg f(gg') \quad \forall g' \in G .$$

Mit diesem Maß ist die Zustandssumme der reinen Eichtheorie:

$$Z = \int \prod_{\langle i, j \rangle} dg_{\langle i, j \rangle} e^{-\beta E[\{g\}]} .$$

2-dimensionale reine Gittereichtheorien sind integrabel in dem Sinn wie 1-dimensionale Spin-Ketten integrabel sind. Der Grund ist die Eichsymmetrie, die es im Prinzip ermöglicht, das 2-dimensionale Modell auf ein Produkt von (unabhängigen) 1-dimensionalen Modellen zurückzuführen. Wir werden uns im folgenden auf die thermodynamischen Eigenschaften solcher Systeme konzentrieren und insbesondere Feinheiten, die mit Randbedingungen in Zusammenhang stehen, außer acht lassen.

Der erste Schritt zur Lösung einer 2-dimensionalen reinen Gittereichtheorie besteht in der Wahl einer Eichung, für welche alle Gruppenelemente auf zeitartigen Linien zur Identität werden. Man überzeugt sich leicht, daß dies sukzessive möglich ist. Lediglich bei periodischen Randbedingungen kann es passieren, daß ein Gruppenelement auf einer zeitartigen Gitterlinie verbleibt, welches nicht durch eine Eichung zur Identität gebracht werden kann. Solche Randeffekte wollen wir hier vernachlässigen.

Die Energie einer Konfiguration in der sogenannten “temporalen Eichung” ist

$$E[\{g\}] = -\frac{1}{2N} \sum_{\langle i_1, i_2 \rangle, \langle i_3, i_4 \rangle} \text{tr} (g_{\langle i_1, i_2 \rangle} g_{\langle i_3, i_4 \rangle}^{-1} + \text{h.c.} - 2) \quad .$$

(Ihr Wert hat sich durch die Wahl der Eichung natürlich nicht geändert.) Die raumartigen Gitterlinien lassen sich durch die Gitterpunkte durchnummerieren. Bezeichnet $[x, t]$ im folgenden die Linie zwischen Gitterpunkt (x, t) und $(x+1, t)$, so schreibt sich die Energie

$$E[\{g\}] = -\frac{1}{2N} \sum_{x,t} \text{tr} (g_{[x,t]} g_{[x,t+1]}^{-1} + \text{h.c.} - 2) \quad .$$

Man erkennt, daß die Gruppenelemente auf Gitterlinien zu verschiedenen Werten von x nicht mehr in Wechselwirkung stehen. Für die Zustandssumme bedeutet dies

$$\begin{aligned} Z &= \int \prod_l dg_l e^{\frac{\beta}{2N} \sum_{\langle l_1, l_2, l_3, l_4 \rangle} \text{tr} (g_{l_1} g_{l_2} g_{l_3} g_{l_4} + \text{h.c.} - 2)} \\ &= \int \prod_{x,t} dg_{[x,t]} e^{\frac{\beta}{2N} \sum_{x,t} \text{tr} (g_{[x,t]} g_{[x,t+1]}^{-1} + \text{h.c.} - 2)} \\ &= \prod_x \left(\int \prod_t dg_{[x,t]} e^{\frac{\beta}{2N} \sum_t \text{tr} (g_{[x,t]} g_{[x,t+1]}^{-1} + \text{h.c.} - 2)} \right) \\ &= \left(\int \prod_t dg_{[t]} e^{\frac{\beta}{2N} \sum_t \text{tr} (g_{[t]} g_{[t+1]}^{-1} + \text{h.c.} - 2)} \right)^L \end{aligned}$$

Dabei ist L die Größe des Gitters in Raum-Richtung. Beim letzten Schritt wurde ausgenutzt, daß sich das Produkt von Zustandssummen zu L nicht miteinander wechselwirkenden gleichen Systemen als entsprechende Potenz einer Zustandssumme schreiben läßt.

Das Problem ist nun reduziert auf die Berechnung einer Zustandssumme einer linearen Kette. Dazu kann man wieder die Transfermatrix definieren:

$$\langle g|T|g' \rangle = e^{\frac{\beta}{2N} \text{tr} (g' g^{-1} + \text{h.c.} - 2)} \quad .$$

Im allgemeinen gibt es keine geschlossene Formel für die Eigenwerte dieser Matrix. Für abelsche Gruppen jedoch lassen sich die Eigenwerte der Transfermatrix als Summation über die Charaktere der Gruppe darstellen. Dies geschieht analog zum Fall von translationsinvarianten Transfermatrizen, welche sich durch die Charaktere der Translationsgruppe e^{ikn} ausdrücken lassen (siehe Übungszettel).

Zur Bestimmung der freien Energie hat man ein Integral der Form

$$\lambda = \int dg e^{\frac{\beta}{2N} \text{tr} (g + g^+ - 2)}$$

zu berechnen. Der Grenzfall $N \rightarrow \infty$ wurde von D.J. Gross und E. Witten untersucht [Phys. Rev. D 21 (1980) 446; siehe auch: E. Brezin & D.J. Gross, Phys. Lett. B 97 (1980) 120]. Sie fanden in diesem Fall einen Phasenübergang dritter Ordnung. Dies ist ein Beispiel für ein eindimensionales Gittermodell mit einem Phasenübergang. Die Besonderheit – welche die üblichen No-Go-Theoreme umgeht – ist, daß an jedem Gitterpunkt in diesem Grenzfall unendlich viele Freiheitsgrade existieren.

0.8 Verschiedene 2-dimensionale Spin-Modelle

In diesem Abschnitt werden verschiedene Gittermodelle beschrieben, die sich im allgemeinen nicht exakt lösen lassen, die aber trotzdem aus den unterschiedlichsten Gründen eine gewisse Bedeutung erlangt haben. Ihnen gemein ist, daß die lokalen Freiheitsgrade auf den Gitterpunkten definiert sind. Es handelt sich im wesentlichen um naheliegende Verallgemeinerungen des Ising-Modells, darunter die Potts-Modelle und die \mathbf{Z}_p -Modelle, die im nächsten Abschnitt besprochen werden.

Das $U(1)$ -Modell hat besondere Bedeutung wegen des sogenannten Kosterlitz-Thouless-Phasenübergangs in 2 Dimensionen. Eng verbunden mit dem $U(1)$ -Modell ist das sogenannte Villain Modell sowie (ber eine Dualitätstransformation) das diskrete Gausche Modell. Anschließend werden noch die SOS- bzw. RSOS-Modelle diskutiert, die besonders in der Grenzflächenphysik häufige Anwendung finden.

Gerade in den letzten Jahren sind interessante Zusammenhänge entdeckt worden zwischen 2-dimensionalen Gittermodellen und topologischen Problemen der Mathematik. In einigen wenigen Fällen sollen diese im Rahmen dieser Vorlesung zumindest angedeutet werden. Dazu ist es oft sinnvoll, ein statistisches Modell – statt auf einem regelmäßigen Gitter – auf einem allgemeinen (2-dimensionalen) Graphen zu betrachten. Diese allgemeine Formulierung von statistischen Modellen auf 2-dimensionalen Graphen soll daher zunächst angegeben werden.

STATISTISCHE MODELLE AUF 2-DIMENSIONALEN GRAPHEN

Vorab einige grundlegende Definitionen aus dem Bereich der Graphentheorie.

DEFINITION: Ein Graph ist eine Menge V (die Menge der Vertizes) sowie eine Menge E (die Menge der Linien), bestehend aus (ungeordneten) Paaren von Vertizes $E = \{(v_1, v_2) | v_i \in V\}$.

Der Einfachheit halber werden im folgenden Mehrfachverbindungen zwischen Vertizes ausgeschlossen (d.h. ein Paar (v_1, v_2) ist höchstens einmal in E vertreten). Außerdem soll es keine "Selbstloops" geben (d.h. $(v_1, v_2) \in E \Rightarrow v_1 \neq v_2$). Solche Graphen werden auch manchmal definiert als eine Menge V mit einer symmetrischen, nicht-reflexiven Relation auf V . Diese Relation gibt an, ob zwei Vertizes des Graphen benachbart sind. Wir werden oft die Vertizes durch eine Menge $\{i\}$ nummerieren und die Linien durch Paare $\{\langle i, j \rangle\}$ kennzeichnen. Außerdem setzen wir noch voraus, daß V und E endliche Mengen sind.

Der Grad (oder auch die Valenz) eines Vertex ist die Anzahl seiner nächsten Nachbarn. Ein Graph heißt regulär vom Grad d , wenn alle Vertizes denselben Grad d haben.

Ein (geschlossener) Weg der Länge L ist eine Folge von Vertizes (v_1, \dots, v_{L+1}) ($v_{L+1} = v_1$) mit $(v_k, v_{k+1}) \in E$. Eine Zusammenhangskomponente eines Graphen \mathcal{G} ist ein Teilgraph \mathcal{G}' , in welchem jeder Vertex mit jedem anderen Vertex durch einen Weg verbunden werden kann, es aber keine weiteren Vertizes in \mathcal{G} gibt, die mit \mathcal{G}' verbunden sind. Ein Circuit (Kreis) ist ein geschlossener Weg, wobei jede Linie maximal einmal durchlaufen wird. Entfernt man aus einem Graphen eine Linie, die nicht Teil eines Circuits ist, so erhöht sich die Anzahl der Zusammenhangskomponenten des Graphen um 1.

Sei $c(\mathcal{G})$ die maximale Anzahl von Linien, die sich aus dem Graphen entfernen lassen, ohne da sich die Anzahl der Zusammenhangskomponenten erhht. Man sagt auch, der Graph habe $c(\mathcal{G})$ unabhngige Circuits. Seien weiterhin $n(\mathcal{G})$ die Anzahl der Zusammenhangskomponenten von \mathcal{G} , sowie $|E|$ die Anzahl der Linien und $|V|$ die Anzahl der Vertizes des Graphen. Dann gilt die sogenannte Eulersche Formel

$$c(\mathcal{G}) = |E| + n(\mathcal{G}) - |V| . \quad (28)$$

Beweis: Aus einem Graphen kann man genau $c(\mathcal{G})$ Linien entfernen, ohne die Anzahl der Zusammenhangskomponenten zu ndern, danach bleiben $|E| - c$ Linien brig. Jedes weitere Entfernen einer Linie erhht die Anzahl der Zusammenhangskomponenten um 1. $|V| = n + (|E| - c)$ ist somit die Anzahl der Zusammenhangskomponenten wenn alle Linien entfernt wurden, d.h. die Anzahl der Vertizes.

Eine planarer Graph ist ein Graph, der auf einer Sphre (S^2) ohne berschneidung von Linien eingebettet werden kann. Fr einen eingebetteten planaren Graphen ist in offensichtlicher Form die Menge P der Plaketten definiert, die dann z.B. durch eine Folge von Vertizes oder eine Folge von Linien (welche die Plaketten umschliessen) im Graphen gekennzeichnet werden knnen. Ein 2-dimensionaler Graph ist allgemeiner auf einer 2-dimensionalen Flche (z.B. einem Torus) ohne berschneidung von Linien eingebettet, so da alle Plaketten homeomorph zu 2-dimensionalen Scheiben sind.

Sind $|V|$, $|E|$ und $|P|$ die Anzahl der Vertizes, Linien bzw. Plaketten eines 2-dimensionalen Graphen, so gilt eine Beziehung, welche ebenfalls Eulersche Formel genannt wird:

$$|V| - |E| + |P| = \chi \quad (= 2 - 2g) .$$

Hierbei ist χ die Euler-Charakteristik der Flche bzw. g die Anzahl der Henkel der Flche. (Jede 2-dimensionale, kompakte, orientierbare Flche ohne Rand ist topologisch equivalent zu einer Sphre mit g angeklebten Henkeln.)

Den dualen Graphen $\mathcal{D} = \mathcal{G}^*$ zu einem 2-dimensionalen Graphen \mathcal{G} erhlt man folgendermaen: Die Menge der Vertizes V^* des dualen Graphen ist gleich der Menge P der Plaketten von \mathcal{G} . Zwei Vertizes von \mathcal{G}^* sind benachbart, wenn die zugehrigen Plaketten von \mathcal{G} benachbart sind. Damit ist $E^* \simeq E$, denn jede Linie in E trennt zwei Plaketten, die in \mathcal{G}^* benachbart sind. (Im allgemeinen kann ein dualer Graph auch Selbstloops bzw. Mehrfachverbindungen zwischen Vertizes haben. Die angegebene Konstruktion ist auf diesen Fall leicht bertragbar.)

Dies schliet die allgemeinen Bemerkungen aus dem Bereich der Graphentheorie ab. Statistische Modelle lassen sich nun folgendermaen auf Graphen formulieren:

Sei $\Phi_V = \{\varphi\}$ die Menge der lokalen Zustnde auf den Punkten des Graphen und $\Phi_E = \{\hat{\varphi}\}$ die Menge der lokalen Zustnde auf den Linien, so ist ganz allgemein eine Konfiguration ein Paar (C_V, C_E) von Abbildungen

$$C_V := V \longrightarrow \Phi_V \quad C_E := E \longrightarrow \Phi_E .$$

Die Wechselwirkungsenergie einer Konfiguration wird oft von der Form sein

$$E[\{\varphi, \hat{\varphi}\}] = \sum_{\langle i,j \rangle \in E} \epsilon_E(\varphi_i, \varphi_j) + \sum_{i \in V} \epsilon_V[\{\hat{\varphi}_{\langle i,j \rangle} | \langle i,j \rangle \in E\}] .$$

Der erste Term beschreibt eine Wechselwirkung zwischen Freiheitsgraden auf (im Graphen) benachbarten Vertizes, der zweite Term beschreibt eine Wechselwirkung zwischen Freiheitsgraden auf Linien, welche an einem gemeinsamen Vertex zusammentreffen. Speziell fr 2-dimensionale Graphen sind auch lokale Freiheitsgrade auf Plaketten mglich, sowie Wechselwirkungen zwischen Freiheitsgraden auf Linien, welche zu einer Plakette gehen (z.B. reine Eichtheorien auf 2-dimensionalen Graphen).

POTTS-MODELLE

Das Potts-Modell wurde von R.B. Potts in seiner Doktorarbeit 1951 untersucht [Proc. Camb. Phil. Soc. 48 (1952) 106] nach einer Anregung seines Doktorvaters C. Domb. Ein umfangreicher Review-Artikel existiert von F.Y. Wu [*The Potts Model*; Rev. Mod. Phys. 54 (1982) 235]. Einige interessante Eigenschaften sowie Relationen mit anderen Modellen (speziell für den 2-dimensionalen Fall) sind im Buch von Baxter diskutiert [*Exactly Solved Models in Statistical Mechanics*; Academic Press (London) 1982].

Für das sogenannte “ q -Zustands Potts-Modell” sind q lokale Freiheitsgrade auf den Vertices eines Gitters (Graphen) definiert und durch $\varphi \in \{1, 2, \dots, q\}$ gekennzeichnet. Die Wechselwirkungsenergie zwischen zwei benachbarten Punkten im Gitter (Graphen) hängt nur davon ab, ob die lokalen Zustände auf diesen Punkten gleich sind oder nicht:

$$\epsilon(\varphi, \varphi') = -K \delta(\varphi, \varphi') = \begin{cases} 0 & \text{für } \varphi \neq \varphi' \\ -K & \text{für } \varphi = \varphi' \end{cases}$$

Das $q = 2$ -Potts-Modell ist äquivalent zum Ising-Modell ($K = 2\beta$).

Eine oft benutzte Darstellung der Zustandssumme des Potts-Modells erhält man durch folgende Umformung:

$$e^{K \sum_{\langle i,j \rangle} \delta(\varphi_i, \varphi_j)} = \prod_{\langle i,j \rangle} (1 + v \delta(\varphi_i, \varphi_j)) \quad \text{mit } v = e^K - 1 .$$

Ähnlich wie schon bei der Hochtemperaturentwicklung des Ising-Modells kann man das Produkt entwickeln und jede Linie des Gitters (Graphen), für welche man einen Beitrag vom zweiten Term erhält, markieren.

Im ersten Term dieser Entwicklung ist keine Linie markiert, die Summation über die Freiheitsgrade gibt einen Beitrag $q^{|V|}$. In der nächsten Ordnung dieser Entwicklung, proportional zu v , ist nur eine Linie markiert, dafür gibt es $|E|$ Möglichkeiten. Die lokalen Zustände auf den beiden verbundenen Vertices müssen nun gleich sein (wegen der δ -Bedingung). Man erhält somit einen Beitrag $v \cdot |E| \cdot q^{|V|-1}$.

Ganz allgemein ergibt sich folgende Darstellung der Zustandssumme:

$$Z[\mathcal{G}; q, K] = \sum_{\mathcal{G}' \subseteq \mathcal{G}} v^{|\mathcal{E}(\mathcal{G}')|} q^{n(\mathcal{G}')} , \quad (29)$$

wobei die Summe über alle möglichen Einteilungen des Graphen \mathcal{G} in Teilgraphen \mathcal{G}' läuft, die man durch Weglassen von Linien in \mathcal{G} erhält. $|\mathcal{E}(\mathcal{G}')|$ ist die Anzahl der markierten Linien dieser Einteilung, und $n(\mathcal{G}')$ die Anzahl der Zusammenhangskomponenten (wobei ein Teilgraph, der nur aus einem Punkt besteht, eine Zusammenhangskomponente darstellt). Summen dieser Art treten in der Graphentheorie häufig auf, so gibt es dort die sogenannte Whitney-Funktion:

$$W_{\mathcal{G}}(x, y) = \sum_{\mathcal{G}' \subseteq \mathcal{G}} x^{|\mathcal{E}(\mathcal{G}')|} \left(\frac{y}{x}\right)^{c(\mathcal{G}')} .$$

Zusammen mit der Eulerschen Formel (Gl.28) folgt

$$Z[\mathcal{G}; q, K] = q^{|V|} W_{\mathcal{G}}\left(\frac{v}{q}, v\right) .$$

Für die Whitney-Funktion ist eine Dualitätstransformation bekannt, deren Ableitung in der Formulierung des Potts-Modells skizziert werden soll.

Sei \mathcal{D} der duale Graph zu \mathcal{G} . Zu jedem $\mathcal{G}' \subseteq \mathcal{G}$ konstruiere man einen Graphen $\mathcal{D}' \subseteq \mathcal{D}$ durch folgende Vorschrift: Die Vertices von \mathcal{D}' und die von \mathcal{D} sind gleich; die Linien in \mathcal{D}' sind genau diejenigen, deren dualen Linien in \mathcal{G}' nicht belegt sind.

Da nach Konstruktion jeder elementare Circuit in \mathcal{G}' genau eine Zusammenhangskomponente von \mathcal{D}' umschließt und umgekehrt, gilt

$$n(\mathcal{D}') = c(\mathcal{G}') + 1 \quad n(\mathcal{G}') = c(\mathcal{D}') + 1 \quad .$$

Außerdem ist

$$|E(\mathcal{G}')| + |E(\mathcal{D}')| = |E| \quad .$$

Damit erhalten wir

$$Z[\mathcal{G}; q, K] = v^{|E|} q^{1-|V(\mathcal{D})|} \sum_{\mathcal{D}' \subseteq \mathcal{D}} \left(\frac{q}{v}\right)^{|E(\mathcal{D}')|} q^{n(\mathcal{D}')} = v^{|E|} q^{1-|V(\mathcal{D})|} Z[\mathcal{D}; q, K^*] \quad .$$

Der Zusammenhang zwischen den dualen Kopplungen ist

$$vv^* = q \quad \text{bzw.} \quad (e^K - 1)(e^{K^*} - 1) = q \quad .$$

Für ein 2-dimensionales quadratisches Gitter mit periodischen Randbedingungen (welches selbstdual ist) folgt damit für die kritische Temperatur (wiederum unter der Annahme, daß es nur einen Phasenübergang gibt)

$$K_c = \ln(1 + q^{\frac{1}{2}}) \quad .$$

Für $q \leq 4$ hat das 2-dimensionale Potts-Modell einen Phasenübergang 2. Ordnung. Für $q > 4$ ist der Phasenübergang 1. Ordnung, d.h. die innere Energie macht einen Sprung bei K_c und es gibt eine latente Wärme.

Ein interessanter Grenzfall ergibt sich für $K \rightarrow -\infty$. Das Potts-Modell wird antiferromagnetisch "eingefroren", d.h. Zustände auf benachbarten Vertices müssen verschieden sein. Dies zeigt einen Zusammenhang zum sogenannten "Farben-Problem" in der Mathematik: Die Zustandssumme des q -Zustand-Potts-Modells im Grenzfall $K \rightarrow -\infty$ ist gleich der Anzahl der Möglichkeiten, die Vertices des Graphen mit q Farben so zu markieren, daß keine benachbarten Vertices dieselbe Farbe haben. Für den dualen Graphen eines 2-dimensionalen Graphen ist die Zustandssumme somit gleich der Anzahl der Möglichkeiten, die Flächen mit q Farben einzufärben, so daß keine zwei benachbarten Flächen die gleiche Farbe haben.

Das berühmte 4-Farben-Theorem läßt sich also folgendermaßen formulieren: Für jeden planaren Graphen \mathcal{G} , dessen dualer Graph \mathcal{D} regulär vom Grad 3 ist (d.h. es treffen sich immer nur drei Flächen an einem Vertex), ist die Zustandssumme des $q = 4$ -Potts-Modells auf diesem Graphen im Grenzfall $K \rightarrow -\infty$ verschieden von 0.

In dem Grenzfall $K \rightarrow -\infty$ ($v = -1$) erhalten wir aus Gl.29 die sogenannte Birkhoff Formel (1912) für die Anzahl der möglichen Färbungen der Vertices eines Graphen mit q Farben, so daß benachbarte Vertices ungleiche Farben haben:

$$P_{\mathcal{G}}(q) = \sum_{\mathcal{G}' \subseteq \mathcal{G}} (-1)^{|E(\mathcal{G}')|} q^{n(\mathcal{G}')} \quad .$$

Das Potts-Modell in der Form (Gl.29) stellt in zweierlei Hinsicht eine Verallgemeinerung des allgemeinen Farbenproblems für Graphen dar: Zum einen ist die Zustandssumme für beliebige Werte von q definiert, also nicht nur für natürliche Zahlen. Zum anderen bedeuten endliche Werte für K eine "Aufweichung" der Bedingung $\varphi_i \neq \varphi_j$ für $\langle i, j \rangle \in E$.

\mathbb{Z}_p -MODELLE

\mathbf{Z}_p -Modelle wurden ebenfalls von Potts (auf Vorschlag von Domb) in seiner Doktorarbeit untersucht. Daher heien sie manchmal auch “planar Potts model” oder “clock Potts model”. Wiederum sind lokale Freiheitsgrade $\varphi \in \{1, \dots, p\}$ auf den Gitterpunkten (Vertizes) definiert, die Energie einer Konfiguration ist

$$E = K \sum_{\langle i,j \rangle} \left(1 - \cos\left(\frac{2\pi}{p}(\varphi_i - \varphi_j)\right) \right) . \quad (30)$$

Die Transformation $\varphi_i \rightarrow \varphi_i + \frac{2\pi n}{p}$ ist eine offensichtliche Invarianz des Modells und bildet die Gruppe \mathbf{Z}_p .

Für $p = 2$ erhalt man das Ising-Modell, für $p = 3$ ist das Modell äquivalent zum $q = 3$ -Potts-Modell. Für $q = 4$ kann man sich leicht überzeugen, daß das Modell in zwei – nicht miteinander wechselwirkende – Ising-Modelle umgeschrieben werden kann.

Alle \mathbf{Z}_p -Modelle haben für hohe Temperaturen eine ungeordnete Phase, für genügend kleine Temperaturen eine Phase mit spontaner Symmetriebrechung:

$$\left\langle \cos\left(\frac{2\pi}{p}(\varphi_i - \varphi_j)\right) \right\rangle \xrightarrow{|i-j| \rightarrow \infty} \begin{cases} 0 & T \text{ genügend groß} \\ \mu > 0 & T \text{ genügend klein} \end{cases} . \quad (31)$$

Die genaue Analyse der Phasenstruktur für 2-dimensionale \mathbf{Z}_p -Modelle hat eine interessante Geschichte. Ursprünglich untersuchte man \mathbf{Z}_p -Modelle, da sie eine Interpolation zwischen dem Ising-Modell und dem sogenannten $U(1)$ -Modell darstellen. Das letztere erhält man im Grenzfall $p \rightarrow \infty$. Vom $U(1)$ -Modell glaubte man lange Zeit, daß es keinen Phasenbergang besitzt, da man beweisen konnte, daß es keine Phase mit spontaner Symmetriebrechung für 2-dimensionale Modelle mit kontinuierlicher Symmetriegruppe geben kann (näheres dazu im nächsten Abschnitt.) Nach lateren Theorien (hauptsächlich von Landau) stellte man sich einen Phasenbergang in Spin-Modellen immer im Zusammenhang mit spontaner Brechung der \mathbf{Z}_p -Symmetrie vor. Man vermutete, daß für wachsendes p dieser bergang (bzw. bergunge – für Werte von p für welche mehrere Symmetriebrechungen möglich sind) bei immer tieferen Temperaturen stattfindet und schließlich bei $p = \infty$ ganz verschwindet.

1972 entdeckten Kosterlitz und Thouless einen Mechanismus, der sie vermuten lie, daß das $U(1)$ -Modell einen Phasenbergang hat (siehe nächsten Abschnitt). Dieser bergang ist verknüpft mit einer sogenannten “masselosen Phase”, d.h. die Korrelationsfunktion (31) fällt asymptotisch nur wie eine Potenz (statt exponentiell) des Abstands ab. 1979 argumentierten S. Elitzur, R.P. Pearson und J. Shigemitsu [Phys. Rev. D 19 (1979) 3698], daß auch das \mathbf{Z}_p -Modell für genügend große Werte von p ($p \geq 5$) eine solche masselose Phase haben muß. Bewiesen wurden diese Behauptungen (sowohl für $U(1)$ als auch \mathbf{Z}_p) 1981 von J. Fröhlich und T. Spencer [Commun. Math. Phys. 81 (1981) 527].

Für die \mathbf{Z}_p -Modelle auf 2-dimensionalen Gittern ergibt sich damit folgende Struktur:

Für $p = 2, 3$ und 4 existieren zwei Phasen, getrennt durch einen Phasenbergang 2. Ordnung, mit spontaner Symmetriebrechung in der Tieftemperaturphase. Für $p \geq 5$ haben die \mathbf{Z}_p -Modelle insgesamt 3 Phasen: Für T genügend hoch gibt es eine ungeordnete Phase, die Korrelationsfunktion (31) geht exponentiell gegen 0. Für T genügend tief gibt es eine Phase mit spontaner Symmetriebrechung, der asymptotische Wert der Korrelationsfunktion μ wird ebenfalls exponentiell angenommen. Zwischen diesen beiden Phasen gibt es eine masselose Phase, die Korrelationsfunktion geht mit einer temperaturabhängigen Potenz von $|i - j|$ gegen 0:

$$\left\langle \cos\left(\frac{2\pi}{p}(\varphi_i - \varphi_j)\right) \right\rangle \xrightarrow{|i-j| \rightarrow \infty} \begin{cases} c_1 e^{-m_1(T)|i-j|} & T > T_2 \\ c' |i-j|^{-\gamma(T)} & T_1 \leq T \leq T_2 \\ \mu(T) + c_2 e^{-m_2(T)|i-j|} & T < T_1 \end{cases} . \quad (32)$$

Die Phasenübergänge bei T_1 und T_2 sind beide von der Art des Kosterlitz–Thouless–Übergangs, insbesondere hat die Korrelationslänge $m_i^{-1}(T)$ im Bereich außerhalb der masselosen Phase in der Nähe des Übergangs eine wesentliche Singularität der Form

$$m_i^{-1} \simeq \exp\left(\frac{c_i}{(T - T_i)^{1/2}}\right) .$$

Für wachsende Werte von p wird T_1 kleiner: $T_1(p) \xrightarrow{p \rightarrow \infty} 0$. Der Wert von T_2 stabilisiert sich bei der kritischen Temperatur des $U(1)$ -Modells.

Die Existenz einer masselosen Phase in 2-dimensionalen \mathbf{Z}_p -Modellen deutet auf interessante, zum Teil noch unverstandene Zusammenhänge in diesen Modellen hin. Nicht nur, da diese Struktur der klassischen Vorstellung von Phasenübergängen (wie sie z.B. in mehr als 2 Dimensionen realisiert ist) widerspricht. Eine masselose Phase wird allgemein auch mit kontinuierlichen Freiheitsgraden – im Hinblick auf das $U(1)$ -Modell auch mit einer kontinuierlichen Symmetrie – in Verbindung gebracht. Man vermutet daher einen Mechanismus von “symmetry-enhancement” in diesen Modellen (d.h. die wirkliche Symmetrie ist möglicherweise größer als die offensichtliche \mathbf{Z}_p -Symmetrie).

DER KOSTERLITZ–THOULESS PHASENÜBERGANG IM $U(1)$ -MODELL

Das $U(1)$ -Modell (auch $O(2)$ -Modell oder planares XY -Modell genannt) wird durch eine Winkelvariable $\varphi \in [0, 2\pi)$ auf den Vertices definiert, die Energie ist

$$E = K \sum_{\langle i, j \rangle} (1 - \cos(\varphi_i - \varphi_j)) .$$

Nach einem Theorem von N.D. Mermin und H. Wagner [Phys. Rev. Lett. 17 (1966) 1133; J. Math. Phys. 8 (1967) 1061] gibt es keine spontane Symmetriebrechung für das $U(1)$ -Modell auf 2-dimensionalem Gitter, d.h., die Korrelationsfunktion verschwindet für große Abstände

$$\langle \cos(\varphi_i - \varphi_j) \rangle \xrightarrow{|i-j| \rightarrow \infty} 0 \quad \text{für } T \neq 0 .$$

Beliebig kleine thermische Fluktuationen zerstören also eine globale Ausrichtung der Spins. Somit glaubte man, da es keinen Phasenübergang in diesem Modell gibt.

Nachdem insbesondere numerische Untersuchungen dieses Modells ein unterschiedliches Verhalten für tiefe und hohe Temperaturen andeuteten, formulierten Kosterlitz und Thouless einen Mechanismus für einen Phasenübergang, der nicht mit einer spontanen Brechung der $U(1)$ -Symmetrie verknüpft ist [J. Phys. C 6 (1973) 1181; J. Phys. C 7 (1974) 1046]. Sie nannten diesen Mechanismus “topologische Symmetriebrechung”, heute heißt er meist “Kosterlitz–Thouless–Phasenübergang”. Im folgenden sollen die heuristischen Argumente von Kosterlitz und Thouless bezüglich der Art des Phasenübergangs erlutert werden.

Für tiefe Temperaturen tendieren die Spins dazu, in dieselbe Richtung zu zeigen. Nun gibt es Konfigurationen – sogenannte “Vortex-Konfigurationen” oder “Vortizes” – bei denen fast alle Spins nahezu parallel zu ihren Nachbarn ausgerichtet sind, die aber “topologisch” nicht-trivial sind in dem Sinn, da die Magnetisierung sich entlang eines geschlossenen Weges um das “Zentrum” dieser Vortizes um ein Vielfaches von 360° dreht (siehe Abb.). Die Windungszahl der Magnetisierung einer Vortex-Konfiguration bezeichnet man als ihre “Ladung”.

Die Energie einer Vortex-Konfiguration in einem Gebiet vom Radius R (in Einheiten des Gitterabstands) um das Zentrum der Konfiguration lässt sich in führender Ordnung abschätzen: Zwei benachbarte Spins im Abstand l vom Zentrum haben eine Winkeldifferenz von $\delta\varphi \approx 1/l$. Damit ergibt sich für den Beitrag zur Energie dieser beiden Spins: $E_{(i,j)} \approx 1/(2l^2)$. Summieren wir über alle Spins im Abstand l , so folgt $\Delta E(l) \approx \pi/l$. Für die aufintegrierte Energie bis zum Abstand R ergibt sich somit

$$E(R) \approx \pi \ln R \quad .$$

Andererseits kann das Zentrum eines Vortex an jedem Punkt der Fläche im Radius R sein, d.h. seine Entropie ist proportional zu $S \propto 2 \ln R$. Der Beitrag zur freien Energie ist somit

$$F|_{\text{Vortex}} \approx 2 \ln R - \beta\pi \ln R \quad .$$

Man kann also erwarten, dass für tiefe Temperaturen (also große Werte von β), freie Vortex-Konfigurationen durch die hohe Energie unterdrückt werden. Sie liefern keinen wesentlichen Beitrag zur freien Energie. Für hohe Temperaturen (kleine Werte von β) überwiegt jedoch die Entropie, d.h. das Auftreten vieler freier Vortex-Konfigurationen wird wahrscheinlich.

Die heuristische Argumentation von Kosterlitz und Thouless untersucht das Verhalten einer 2-Vortex-Konfiguration entgegengesetzter Ladung. Eine genaue Analyse zeigt, dass die Energie einer solchen Konfiguration für Vortizes im Abstand R durch $E_2 \approx \frac{1}{2\pi} \ln R$ gegeben ist. Die Entropie bestimmt sich aus der Anzahl der Positionen der Zentren, d.h. ein Faktor $A = R^2$ für das Zentrum eines Vortex und ein Faktor R für den verbleibenden Vortex. Die Entropie-Energie-Bilanz ist:

$$F_2 \approx (3 - \frac{1}{2\pi}\beta) \ln R \quad .$$

Für genügend große Werte von β wird die Energie zweier weit voneinander getrennter Vortex-Konfigurationen zu groß relativ zu ihrer Entropie, d.h. Vortex-Paare werden sich zu gebundenen Zuständen zusammenfinden. Für kleine Werte von β hingegen überwiegt der Beitrag der Entropie und Vortizes treten als freie Konfigurationen auf.

Frohlich und Spencer haben im wesentlichen diese qualitativen Argumente durch detaillierte Abschätzungen zu einem Beweis für die Existenz eines Phasenübergangs ausbauen können. Man kann sich die Vortizes wie Quasiteilchen vorstellen. Kleine Abweichungen um die Vortex-Konfigurationen sind lokale Spinfluktuationen, die perturbativ behandelt werden können. Diese Quasiteilchen finden sich bei tiefen Temperaturen zu gebundenen Zuständen von Vortex-Anti-Vortex-Konfigurationen zusammen. Diese zerstören die globale Ausrichtung der Spins kaum und führen somit zu langreichweitigen Korrelationen (der masselosen Phase). Für hohe Temperaturen hat man näherungsweise ein Gas freier Vortizes,

hnlich wie in einem Plasma. Korrelationen der Spin-Richtung klingen exponentiell ab entsprechend der Debye-Lnge der Ladungsabschirmung im Plasma.

$$\langle \cos(\varphi_i - \varphi_j) \rangle \xrightarrow{|i-j| \rightarrow \infty} \begin{cases} c' |i-j|^{-\gamma(T)} & T \leq T_c \\ c e^{-m(T)|i-j|} & T > T_c \end{cases} \quad (33)$$

Dieses Bild fr die Vortizes als relevante Freiheitsgrade des $U(1)$ -Modells wird im nchsten Abschnitt anhand eines hnlichen Modells noch quantitativer erlutert. Eine ausfhrliche Darstellung dieser Zusammenhnge findet sich in einem bersichtsartikel von Nienhus [B. Nienhus; *Coulomb Gas Formulation of Two-Dimensional Phase Transitions*; in: *Phase Transitions and Critical Phenomena*, Vol. 11; Eds. C. Domb & J.L. Lebowitz; Academic Press, London (1987)].

Kosterlitz und Thouless haben die Art des Phasenbergangs mit Renormierungsgruppenmethoden weiter untersucht und fanden fr die Korrelationslnge $m(T)$ eine wesentliche Singularitt bei $T = T_c$:

$$m(T) \propto \exp\left(-\frac{c}{|T - T_c|^{1/2}}\right) \quad \text{fr } T \geq T_c .$$

Die freie Energie ist beliebig oft stetig differenzierbar am kritischen Punkt, ist allerdings dort nicht reell analytisch (d.h. nicht durch eine Taylorreihe darstellbar). Der Kosterlitz-Thouless Phasenbergang ist somit von unendlicher Ordnung. Die derzeit genauesten Monte-Carlo-Simulationen fr das $U(1)$ -Modell ergeben $\beta_c = 1.1197(5)$.

DAS VILLAIN-MODELL UND DAS DISKRETE GAUSSISCHE MODELL

1975 schlug J. Villain ein Modell vor, welches wie das $U(1)$ -Modell durch eine reelle, periodische Variable φ beschrieben wird [J. Phys. (Paris) 36 (1975) 581]. Sei

$$\theta(\varphi) = \sum_{n \in \mathbf{Z}} e^{-\frac{\beta}{4\pi}(\varphi - 2\pi n)^2} ,$$

dann ist die Zustandssumme des Villain-Modells gegeben durch

$$Z = \int_{-\pi}^{+\pi} \prod_i d\varphi_i \prod_{\langle i,j \rangle} \theta(\varphi_i - \varphi_j) .$$

($\theta(\varphi)$ ist in der Mathematik bekannt als eine der Jacobischen Theta-Funktionen.) Die Boltzmann-Faktoren des Villain-Modells sind denen des $U(1)$ -Modells gerade fr groe Werte von β (also den besonders interessierenden masselosen Bereich) sehr hnlich. Insbesondere gibt es auch im Villain-Modell topologisch nicht-triviale Konfigurationen. So kann man vermuten, da die qualitative Phasenstruktur dieses Modells gleich dem des $U(1)$ -Modells ist.

Fr das Villain-Modell lt sich wiederum eine Dualittstransformation durchfhren. Dazu bentigen wir die folgende Identitt fr die θ -Funktion:

$$\sum_{n \in \mathbf{Z}} e^{-\frac{\beta}{4\pi}(\varphi - 2\pi n)^2} = \frac{1}{(\beta)^{\frac{1}{2}}} \sum_{k \in \mathbf{Z}} e^{-\frac{\pi}{\beta}k^2 + ik\varphi} .$$

Beweis: Wir ersetzen die Summation ber \mathbf{Z} durch ein Integral ber die periodische δ -Funktion. Fr diese setzen wir die Fourier-Darstellung ein, was fr die Integration zu einem Gausschen Integral fhrt:

$$\begin{aligned} \sum_{n \in \mathbf{Z}} e^{-\frac{\beta}{4\pi}(\varphi - 2\pi n)^2} &= \int_{-\infty}^{+\infty} dx \sum_{n=-\infty}^{+\infty} \delta(n-x) e^{-\frac{\beta}{4\pi}(\varphi - 2\pi x)^2} \\ &= \int_{-\infty}^{+\infty} dx \sum_{k=-\infty}^{+\infty} e^{2\pi i k x} e^{-\frac{\beta}{4\pi}(\varphi - 2\pi x)^2} \\ &= \frac{1}{(\beta)^{\frac{1}{2}}} \sum_{k=-\infty}^{+\infty} e^{-\frac{\pi}{\beta} k^2 + ik\varphi} \end{aligned}$$

Damit erhalten wir fr die Zustandssumme des Villain-Modells:

$$Z = \frac{1}{(\beta)^{|E|/2}} \int_{-\pi}^{+\pi} \prod_i d\varphi_i \sum_{\{k_{\langle i,j \rangle}\} \in \mathbf{Z}} e^{\sum_{\langle i,j \rangle} ik_{\langle i,j \rangle}(\varphi_i - \varphi_j)} e^{-\frac{\pi}{\beta} \sum_{\langle i,j \rangle} (k_{\langle i,j \rangle})^2} .$$

Die Variable $\{k_{\langle i,j \rangle}\}$ kann man als Freiheitsgrade auffassen, die auf den (gerichteten) Linien des Gitters definiert sind. Die Integration ber die Winkel-Variable φ fhrt an jedem Vertex zu einer ‘‘Impulserhaltung’’, d.h. zu der Zwangsbedingung, da die Summe der $\{k_{\langle i,j \rangle}\}$ an jedem Vertex verschwinden mu:

$$Z = \frac{1}{(\beta)^{|E|/2}} \sum_{\{k_{\langle i,j \rangle}\} \in \mathbf{Z}} \prod_i \delta\left(\sum_{j|\langle i,j \rangle \in E} k_{\langle i,j \rangle}\right) e^{-\frac{\pi}{\beta} \sum_{\langle i,j \rangle} (k_{\langle i,j \rangle})^2} .$$

Die Zwangsbedingungen lassen sich durch Wahl neuer Freiheitsgrade $\{l_\alpha\} \in \mathbf{Z}$, ($\alpha \in P$) auf den Plaketten des Gitters (den dualen Vertizes) eliminieren: Sei $\langle i,j \rangle$ eine Linie, welche die Plakette α und β trennt (so da α auf der rechten Seite der gerichteten Linie ist), dann definieren wir

$$k_{\langle i,j \rangle} = l_\alpha - l_\beta .$$

Fr jede Konfiguration $\{l_\alpha\}$ erfllen die daraus resultierenden $\{k_{\langle i,j \rangle}\}$ die Zwangsbedingungen. Umgekehrt lt sich bei Vorgabe der Freiheitsgrade auf den Gitterlinien, welche die Zwangsbedingungen erfllen, eine (bis auf eine globale Konstante eindeutige) Konfiguration von $\{l_\alpha\}$ zureckgewinnen. Dazu whlt man willkrlich eine Plakette aus, auf welcher l den Wert 0 annimmt, und definiert l_α fr eine Plakette α durch ‘‘Aufintegration’’ der Differenzen der $\{k\}$'s entlang der Linien eines (dualen) Weges, der die beiden Plaketten verbindet. Diese Integration ist unabhngig von der Wahl des Weges (wegen der Zwangsbedingungen).

Man vergleiche dies mit der entsprechenden Kontinuumskonstruktion in 2 Dimensionen: Sei ein Vektorfeld $\Phi_\mu(x)$ auf der Ebene gegeben, dann lt sich das System $\partial_\mu X(x) = \Phi_\mu(x)$ integrieren, sofern das Vektorfeld rotationsfrei ist: $\epsilon_{\mu\nu} \partial_\nu \Phi_\mu = 0$. $\{\Phi\}$ entspricht den Freiheitsgraden $\{k\}$ auf den (dualen) Gitterlinien, die Rotationsfreiheit der Zwangsbedingung $\sum k = 0$ an jedem Vertex.

Auch von den Gitter-Eichtheorien ist diese Konstruktion vertraut. Seien e^{ikx} (fr ein festes x) Elemente einer $U(1)$ auf den (dualen) Gitterlinien. Die Zwangsbedingung fr die k 's bedeutet, da das Produkt der Eichfreiheitsgrade um jede (duale) Plakette gleich der Identitt ist. Es handelt sich also um eine sogenannte ‘‘pure gauge’’ Konfiguration. Diese besitzt immer eine Lsung durch Gruppenvariable auf den Vertizes.

Ersetzen wir die Variable $\{k_{\langle i,j \rangle}\}$ auf den Gitterlinien durch die Variable $\{l_\alpha\}$ auf den Plaketten des Gitters, so erhalten wir

$$Z = \frac{1}{(\beta)^{|E|/2}} \sum_{\{l_\alpha\} \in \mathbf{Z}} e^{-\frac{\pi}{\beta} \sum_{\langle \alpha, \beta \rangle} (l_\alpha - l_\beta)^2} . \quad (34)$$

Die Summe im Exponenten luft ber alle Paare von benachbarten Plaketten. Das statistische Modell (34) heit “diskretes Gausches Modell”. Dieses Modell ist also dual zum Villain-Modell, mit einer dualen Temperatur $\beta^* = 2\pi/\beta$. Fr sehr groe Werte von β spielt die diskrete Natur der Freiheitsgrade kaum eine Rolle, man kann sich neue “effektive” Freiheitsgrade $X_\alpha = l/\beta$ vorstellen, so da fr diesen Temperaturbereich das diskrete Gausche Modell eine hnliche Struktur wie das kontinuierliche Gausche Modell hat:

$$Z_{\text{Gauss}} = \int \prod_{\alpha} dX_{\alpha} e^{-\frac{\beta^*}{2} \sum_{\langle \alpha, \beta \rangle} (X_{\alpha} - X_{\beta})^2} .$$

Das kontinuierliche Gausche Modell ist immer in einer masselosen Phase, in 2 Dimensionen existieren logarithmische Korrelationen:

$$\langle (X_{\alpha} - X_{\beta})^2 \rangle \xrightarrow{|\alpha - \beta| \rightarrow \infty} c \ln |\alpha - \beta| ,$$

bzw.

$$\langle e^{ik(X_{\alpha} - X_{\beta})} \rangle \xrightarrow{|\alpha - \beta| \rightarrow \infty} c' |\alpha - \beta|^{2ck^2} .$$

Fr tiefe Werte von β ist die diskrete Natur des Freiheitsgrades in (34) wesentlich. Das Modell hat eine Phase, in welcher die Werte fr $\{l\}$ im wesentlichen konstant sind, d.h. ihre Differenz verschwindet. In dieser Phase hat das Modell insofern einen “massiven” Charakter als Korrelationen exponentiell gegen den asymptotischen Wert gehen. Der Phasenbergang fr das diskrete Gausche Modell liegt bei $\beta_c^* = 0.6645(6)$. Auch dieser Phasenbergang ist von der Form des Kosterlitz-Thouless-Bergangs.

DAS SOS-MODELL

Das SOS-Modell (solid-on-solid) ist dem diskreten Gauschen Modell sehr hnlich: Ganzzahlige Freiheitsgrade $\{h_{\alpha}\} \in \mathbf{Z}$ sind auf den Plaketten definiert (durch bergang zum dualen Gitter lt sich das Modell natrlich auch durch Freiheitsgrade auf den Vertizes formulieren). Die Energie ist jedoch:

$$E = K \sum_{\langle \alpha, \beta \rangle} |h_{\alpha} - h_{\beta}| . \quad (35)$$

Das SOS-Modell ist eines der bekanntesten Modelle der Grenzflchenphysik. Ein allgemeiner bersichtsartikel zu Modellen von Grenzflchen, unter anderem auch zum SOS-Modell, existiert von Abraham [D.B. Abraham; *Surface Structures and Phase Transitions - Exact Results*; in: *Phase Transitions and Critical Phenomena*, Vol. 10; Eds. C. Domb & J.L. Lebowitz; Academic Press, London (1986)]. Die Interpretation ist folgende: Zwischen zwei Phasen (z.B. durch geeignete Randbedingungen festgehalten) von 3-dimensionalen Systemen bildet sich eine Grenzflche. Von dieser Grenzflche erhalt man einen gesonderten Beitrag zur Gesamtenergie einer Konfiguration, welche von der speziellen Wechselwirkung der Bestandteile auf beiden Seiten der Flche herrhrt. In fhrender Ordnung ist diese zuztliche Energie proportional zur Gesamtflche der Grenzflche. Die statistischen Eigenschaften solcher Grenzflchen sind also durch Zustandssummen der Form

$$Z = \sum_{\text{Grenzflchen } A} e^{-\beta\epsilon|A|} \quad |A| \simeq \text{Flcheninhalt}$$

gegeben. Man denke z.B. an das 3-dimensionale Ising-Modell in der Tieftemperaturentwicklung als Summation ber Grenzflchen. ϵ ist die Energiedifferenz der Wechselwirkung zwischen gleicher und verschiedener Phase.

Für sehr tiefe Temperaturen wird man eine Grenzfläche näherungsweise durch die Angabe der Höhe h_α einer Plakette ober einer Referenzfläche beschreiben können. Die Gesamtfläche ist die Anzahl der Plaketten an der Grenzfläche. (Nebenstehende Abbildung entspricht dem 1-dimensionalen Analogon, also einer Grenzlinie zwischen zwei Phasen eines Oberflächenfilms.)

Der Flächeninhalt der Referenzfläche wird dabei immer auftreten und kann als konstanter Faktor vor die Zustandssumme gezogen werden. Der relevante Beitrag zur Gesamtfläche einer Konfiguration ist gleich der Anzahl der Plaketten, die senkrecht zur Referenzfläche stehen. Eine Plakette der Höhe h_α und eine (bezüglich der Referenzfläche) benachbarte Plakette der Höhe h_β sind durch $|h_\alpha - h_\beta|$ senkrechte Plaketten miteinander verbunden. Die Energie (35) ist also proportional zu der Gesamtzahl der senkrecht zur Referenzfläche stehenden Plaketten.

Der Hauptfehler, den man bei der Näherung der Grenzflächen durch das SOS-Modell macht, ist die Vernachlässigung von "berührenden" Konfigurationen. Diese werden bei höheren Temperaturen eine wesentliche Rolle spielen, so daß das SOS-Modell nur für die Fluktuationen von Grenzflächen bei sehr tiefen Temperaturen eine gute Beschreibung darstellt.

Die Phasenstruktur des SOS-Modells ist ähnlich der des diskreten Gauschen Modells (für kleine Fluktuationen, d.h. $|h_\alpha - h_\beta| < 2$, sind die beiden Modelle gleich). Bei sehr kleinen Werten von β (also dem Bereich, der die Grenzflächen eher schlecht beschreibt) hat man große Fluktuationen der Fläche, man kann das Modell durch eine kontinuierliche Variable beschreiben. Das Modell hat eine masselose Phase mit logarithmischen Korrelationen für Höhenunterschiede. Für große Werte von β ist die Grenzfläche nahezu auf die Minimalfläche eingefroren, Korrelationen klingen exponentiell ab. Der Phasenübergang ist vermutlich wieder vom Typ eines Kosterlitz-Thouless-Übergangs, die kritische Temperatur ist bei $\beta_c = 0.8061(3)$.

Eine verallgemeinerte Klasse von Modellen – jedoch hauptsächlich von theoretischem Interesse – bilden die sogenannten RSOS-Modelle (restricted solid on solid). Bei diesen ist die "Höhe" eine periodische Variable: $h_\alpha \in \mathbf{Z}_N$. Für jeden Wert von N haben diese Modelle einen Phasenübergang. Die kritischen Exponenten dieser Phasenübergänge konnten in den letzten Jahren exakt berechnet werden. Die Modelle sind von mathematischem Interesse, da man für jeden Wert von N eine andere "Universalitätsklasse" des Phasenübergangs erhält, die möglichen Klassen aber durch die RSOS-Modelle erschöpft werden.

Ein anderes verwandtes Modell ist das BCSOS (body centered solid on solid) Modell. Die Höhenfunktion $\{h_\alpha\} \in \mathbf{Z}$ wird in diesem Modell dadurch eingeschränkt, daß sie auf benachbarten Plaketten um ± 1 differieren muß. Solche Konfigurationen teilen das Gitter in ein "gerades" und ein "ungerades" Untergitter auf, mit nächsten Nachbarn jeweils entlang der Diagonalen. Die Energie ist nicht durch die Höhendifferenz direkt benachbarter Plaketten gegeben (denn diese ist immer ± 1), sondern durch diagonal benachbarte Plaketten:

$$E = \sum_{(m,n)} (|h(n,m) - h(n+1,m+1)| + |h(n+1,m) - h(n,m+1)|) .$$

Das BCSOS Modell ist exakt lösbar (van Beijeren, 1977), es ist ein Spezialfall des 6-Vertex-Modells, und wir werden im folgenden Kapitel noch ausführlicher darauf zurückkommen.

0.9 Das 6- und 8-Vertex-Modell

Die Lösung des 8-Vertex-Modells durch Baxter 1972 [Ann. Phys. (N.Y.) 70, S. 193 & 323; Ann. Phys. (N.Y.) 76, S. 1, S. 25 & 48] war nach der Lösung des Ising-Modells durch Onsager der vielleicht größte Erfolg in der Suche nach integrablen statistischen Systemen. Die meisten bis dahin bekannten lösbaren Modelle sind Spezialfälle des 8-Vertex-Modells, wie z.B. das Ising-Modell, die XXZ-Quanten-Spin-Kette oder das BCSOS-Modell, um nur diejenigen aufzulisten, die in dieser Vorlesung bereits erwähnt wurden. Die algebraische Struktur, insbesondere die sogenannte Yang-Baxter-Gleichung, die eng mit der Integrabilität der Vertexmodelle verknüpft ist, ist nach wie vor Gegenstand aktueller Forschung, und es zeigen sich immer wieder überraschende Zusammenhänge mit den verschiedensten Zweigen der Mathematik und Physik.

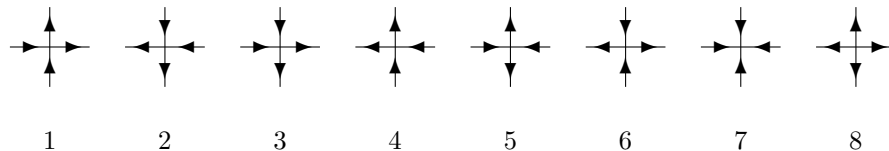
Eine detaillierte, wenn auch teilweise sehr technische Abhandlung der Vertex-Modelle und ihrer Lösung findet man in dem Buch von Baxter [R.J. Baxter; *Exactly Solved Models in Statistical Mechanics*; Academic Press, London (1982)].

DEFINITION DER VERTEX-MODELLE

Die übliche Formulierung der Vertex-Modelle hängt entscheidend von der Struktur des Gitters ab, insbesondere ist das 6- bzw. 8-Vertex-Modell auf einem regulären, quadratischen Gitter definiert. Die Freiheitsgrade sind den gerichteten Linien zugeordnet, und nehmen die Werte ± 1 an:

$$\sigma_{\langle i,j \rangle} = -\sigma_{\langle j,i \rangle} \in \{\pm 1\} \quad .$$

üblicherweise interpretiert man $\sigma_{\langle i,j \rangle}$ als einen gerichteten Pfeil auf der Gitterlinie $\langle i,j \rangle$, und zwar zeigt er in die Richtung, für welche σ positiv ist. Das Gewicht einer Konfiguration hängt davon ab, in welcher Form die Pfeile an einem Vertex zusammenkommen. Ganz allgemein kann es an einem Vertex $2^4 = 16$ verschiedene Kombinationen von Pfeil-Richtungen geben. Das 8-Vertex-Modell ist dadurch definiert, da man nur folgende 8 Möglichkeiten von Anordnungen an einem Vertex zulässt, die dadurch ausgezeichnet sind, da die Gesamtzahl der ein- bzw. auslaufenden Pfeile gerade ist:



Jeder dieser Kombinationen an einem Vertex i kann man ein Gewicht

$$\omega_{\alpha[\{\sigma_{\langle i,j \rangle}\}]} = e^{-\frac{\epsilon_{\alpha}}{kT}} \quad \alpha = 1, \dots, 8 \quad (36)$$

zuordnen, und die Zustandssumme des Modells ist dann gegeben durch

$$Z = \sum_{\{\sigma_{\langle i,j \rangle} = \pm 1\}} \prod_{i \in V} \omega_{\alpha_i} = \sum_C e^{-(n_1 \epsilon_1 + \dots + n_8 \epsilon_8)/kT} \quad . \quad (37)$$

Dabei ist n_{α} die Anzahl der lokalen Anordnungen vom Typ α in einer erlaubten Konfiguration C .

Auf einem Gitter mit periodischen Randbedingungen mu die Anzahl der Kombinationen vom Typ 7 und Typ 8 gleich sein: An Vertizes vom Typ 8 beginnen Wege durch das Gitter (entlang der Pfeilrichtungen), die an Vertizes vom Typ 7 enden. Alle anderen Anordnungen lassen diese Wege durchlaufen bzw. kreuzen. Da die Anzahl der Anfangspunkte solcher Wege auf einem geschlossenen Gitter gleich der Anzahl der Endpunkte sein mu, gilt $n_7 = n_8$. Auerdem gilt $n_5 = n_6$. Dies sieht man folgendermaen: aus jeder erlaubten Konfiguration C erhlt man eineindeutig eine neue erlaubte Konfiguration C' , indem man alle vertikalen (bzw. horizontalen) Pfeilrichtungen umkehrt. Dann werden in C' aber die Vertizes vom Typ 5 bzw. 6 zu den Ursprngen (Typ 8) bzw. Endpunkten (Type 7) von Wegen entlang Pfeilrichtungen.

Da nur die Kombinationen $\epsilon_5 + \epsilon_6$ bzw. $\epsilon_7 + \epsilon_8$ fr das Gewicht in einer erlaubten Konfiguration auftreten, kann man ohne Einschränkung der Allgemeinheit die Wahl treffen:

$$\omega_5 = \omega_6 \quad \text{und} \quad \omega_7 = \omega_8 \quad . \quad (38)$$

Ein interessanter Spezialfall ergibt sich, wenn auerdem noch

$$\omega_1 = \omega_2 \quad \text{und} \quad \omega_3 = \omega_4 \quad (39)$$

gegeben ist. In diesem Fall ist das Modell unverndert unter einer globalen Richtungsnderung aller Pfeile. Es ist dieser Spezialfall, fr den Baxter die freie Energie berechnet hat, und wir werden spter auch nur diesen Fall betrachten.

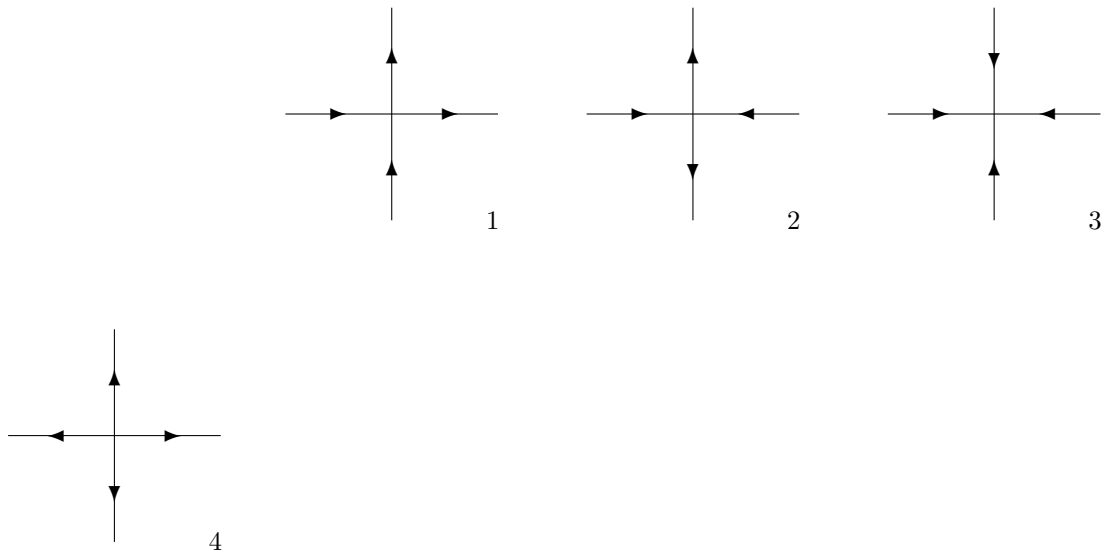
Setzt man $\omega_7 = \omega_8 = 0$ — d.h. verbietet Konfigurationen, bei welchem nicht an jedem Vertex die Anzahl der einlaufenden und auslaufenden Pfeile gleich ist — so erhlt man das sogenannte 6-Vertex-Modell, welches schon 1967 von E.H. Lieb gelst wurde [Phys. Rev. 162 (1967) 162; Phys. Rev. Lett. 18 (1967) 1046; Phys. Rev. Lett. 19 (1967) 108]. Im selben Jahr wurde auch das asymmetrische 6-Vertex-Modell ($\omega_1 \neq \omega_2$ und $\omega_3 \neq \omega_4$) gelst [B. Sutherland, C.N. Yang, C.P. Yang; Phys. Rev. Lett. 19 (1967) 588]. Fr das asymmetrische 8-Vertex-Modell ist bis jetzt keine Lsung bekannt.

Die physikalische Interpretation der Vertex-Modelle stammt aus der Theorie der Kristalle mit Wasserstoff-Bindungen. Das bekannteste Beispiel ist Eis, wobei die Sauerstoff-Atome ein Gitter mit Koordinationszahl 4 bilden, und zwischen je zwei Sauerstoff-Atomen befindet sich ein Wasserstoff-Ion. Diese Ionen sind meist nher an einem ihrer beiden Nachbaratome. Es entsteht also ein elektrischer Dipol zwischen zwei Sauerstoff-Atomen, der durch eine Richtung gekennzeichnet werden kann. Von Slater (1941) stammt der Vorschlag, da die vier Ionen um ein Sauerstoff-Atome die sogenannte "Eis-Regel" erfllen sollen: Zwei Ionen befinden sich nahe an einem Atom und zwei befinden sich entfernter. Diese Regel bedeutet lokale elektrische Neutralitt. In diesem Fall sind gerade die 6 Kombinationen des 6-Vertex-Modells erlaubt, daher nennt man die 6-Vertex-Modelle auch manchmal "ice-type models".

Der oben genannte Spezialfall (39) bedeutet, da die Energie einer Konfiguration unverndert bleibt, wenn alle elektrischen Dipole ihr Vorzeichen ndern. Dies erwartet man, wenn keine ueren elektrischen Felder vorliegen, daher nennt man diesen Spezialfall auch das "zero-field" 8-Vertex-Modell.

Obwohl wir uns in dieser Vorlesung ausschlielich auf den Fall der Vertex-Modelle auf regulren quadratischen Gittern einschnrken werden, seien einige Bemerkungen zu anderen Gittertypen gemacht. Fr jedes regulre Gitter lassen sich Vertex-Konfigurationen und entsprechende Gewichte definieren. Die Eis-Regel der lokalen Neutralitt ist dabei nur auf Gittern mit einer geraden Koordinationszahl (gerader Valenz an jedem Vertex) erfllbar. Auf allgemeinen 2-dimensionalen Graphen ist keine Richtung ausgezeichnet, d.h. Anordnungen, die durch eine Drehung auseinander hervorgehen, sind nicht

unterscheidbar. Für einen 2-dimensionalen, regulären Graphen vom Grad 4 bedeutet dies, da von den 8 Anordnungen des 8-Vertex-Modells nur 4 unterscheidbar sind:



Die lokale Neutralität schränkt diese noch auf die ersten beiden Anordnungen ein. Die Anzahl der Anordnungen 3 und 4 müssen wiederum gleich sein, so da man ohne Einschränkung $\omega_3 = \omega_4$ wählen kann. Außerdem ist die Anzahl der anderen beiden Anordnungen in einer erlaubten Konfiguration jeweils gerade.

QUIVALENTE FORMULIERUNGEN UND SPEZIALFÄLLE

Das 8-Vertex-Modell lässt sich als Spin-Modell auf einem regulären quadratischen Gitter umschreiben. Der Einfachheit willen wählen wir die Spinvariable auf den Plaketten des Gitters, obwohl natürlich durch Übergang zum dualen Gitter auch eine Definition der Variable auf den Vertices möglich ist. Der Grund, da diese Umschreibung möglich ist, liegt in der Bedingung

$$\sum_j \sigma_{\langle i,j \rangle} = 0 \pmod{2} \quad \text{bzw.} \quad \prod_j \sigma_{\langle i,j \rangle} = 1 \quad \forall i \in V ,$$

die einer diskretisierten "Divergenzfreiheit" (modulo 2) der Variablen auf den Gitterlinien entspricht. Für solche Konfigurationen lassen sich Spin-Variablen auf den Plaketten ("2-Formen") finden, so da die sich Freiheitsgrade auf den Linien durch Differenzen der Spin-Variablen ausdrücken lassen.

Bezeichnet (n, m) die Koordinaten einer Plakette, so definiert man die Energie

$$E = \sum_{n,m} [\begin{array}{l} J_v s(n, m)s(n, m+1) + J_h s(n, m)s(n+1, m) \\ + J' s(n, m+1)s(n+1, m) + J'' s(n, m)s(n+1, m+1) \\ + J_4 s(n, m)s(n+1, m)s(n, m+1)s(n+1, m+1) \end{array}] .$$

Neben einer 2-Spin-Wechselwirkung für direkt benachbarte sowie diagonal benachbarte Spins enthält das Modell auch eine 4-Spin-Kopplung für Spins auf den vier Plaketten um einen Vertex. Die Energie ist offensichtlich invariant unter einem globalen Vorzeichenwechsel der Spins $\{s\} \rightarrow \{-s\}$.

Sei $\langle i, j \rangle$ die Gitterlinie, welche zwei benachbarte Plaketten (n, m) und (n', m') trennt, so definieren wir

$$\sigma_{\langle i, j \rangle} = s(n, m)s(n', m') \quad .$$

Bildet man das Produkt von σ -Variablen auf den vier Linien um einen Vertex (allgemeiner das Produkt von σ -Variablen auf dualen geschlossenen Wegen, d.h. Wegen, die sich als Folge von Trennlinien von benachbarten Plaketten schreiben lassen), so erhält man immer 1. Jede Konfiguration von Spin-Variablen definiert also eine erlaubte Konfiguration des 8-Vertex-Modells für die σ -Variablen auf den Linien des Gitters.

Umgekehrt definiert eine erlaubte Konfiguration des 8-Vertex-Modells auch eine Spin-Konfiguration (bis auf ein globales Vorzeichen). Dies zeigt man ganz analog zur Konstruktion, die wir schon bei der Dualitätstransformation des Villain-Modells im letzten Kapitel betrachtet haben. Man wählt sich auf einer Referenzplakette einen Spin. Für jede andere Plakette betrachtet man einen Verbindungsweg von dualen Linien (d.h. eine Folge von Trennlinien benachbarter Plaketten), die diese beiden Plaketten verbinden und definiert den Spin auf der zweiten Plakette als das Produkt der Variablen σ auf den dualen Linien entlang des Weges. Diese Definition ist eindeutig, da das Produkt der σ -Variablen entlang geschlossener Wege immer 1 ist.

Für periodische Randbedingungen kann es zu einer sogenannten "Frustrationslinie" kommen. Dies geschieht dann, wenn das Produkt der σ -Variablen entlang geschlossener Wege, die sich um das Gitter herumwinden, nicht 1 ist. Man erkennt die Analogie zum Satz von Poincaré, da rotationsfreie Vektorfelder in 2 Dimensionen nur auf einfach zusammenhängenden Gebieten immer eindeutig integrierbar sind. Wir wollen auf diese topologische Komplikation, die keine Auswirkungen auf die freie Energie des Systems hat, hier nicht weiter eingehen.

Man überzeugt sich leicht, da zwischen den Energien ϵ_α zu den Anordnungen im 8-Vertex-Modell und den Kopplungen $\{J\}$ im Spin-Modell folgende Zusammenhänge bestehen:

$$\begin{aligned} \epsilon_1 &= -J_h - J_v - J - J' - J_4 \quad , & \epsilon_2 &= J_h + J_v - J - J' - J_4 \quad , \\ \epsilon_3 &= -J_h + J_v + J + J' + J_4 \quad , & \epsilon_4 &= J_h - J_v + J + J' - J_4 \quad , \\ \epsilon_5 &= \epsilon_6 = J - J' + J_4 \quad , & \epsilon_7 &= \epsilon_8 = -J + J' + J_4 \end{aligned}$$

Insbesondere erhält man das "zero-field" 8-Vertex-Modell für die Wahl $J_v = J_h = 0$, d.h. es besteht keine 2-Spin-Kopplung zwischen direkt benachbarten Spins. Die diagonalen Kopplungen teilen das Gitter in zwei gleiche Untergitter. Man kann sich also das 8-Vertex-Modell als zwei Ising-Systeme vorstellen, welche über die 4-Spin-Kopplung miteinander wechselwirken. Insbesondere erhält man im Fall $J_4 = 0$ eine Entkopplung der beiden Systeme und zwei identische Kopien des einfachen Ising-Modells.

Im folgenden sollen einige bekannte Spezialfälle des 8-Vertex- bzw. 6-Vertex-Modells aufgelistet werden:

1. Ising-Modell:

Aus dem allgemeinen 8-Vertex-Modell erhält man das Ising-Modell im Grenzfall $J = J' = J_4 = 0$, für das isotrope Modell gilt noch $J_v = J_h$. Die Lösung von Baxter bezieht sich jedoch nur auf das "zero field" 8-Vertex-Modell, welches nicht von dieser Form ist. Wir hatten jedoch gesehen, da für $J_4 = 0$ das zero field 8-Vertex-Modell zu zwei entkoppelten Ising-Systemen wird. Insofern ist das Ising-Modell ein Spezialfall des 8-Vertex-Modells, jedoch kein Spezialfall des 6-Vertex-Modells.

2. Eis-Modell:

In diesem Fall gibt die Eis-Regel die einzige Einschränkung für eine Konfiguration, die verbleibenden Gewichte sind gleich:

$$\omega_1 = \dots = \omega_6 = 1 \quad \omega_7 = \omega_8 = 0 \quad .$$

3. F Modell:

Rys schlug 1963 ein Modell für anti-ferroelektrische Systeme vor mit Gewichten:

$$\omega_1 = \dots = \omega_4 < 1 \quad \omega_5 = \omega_6 = 1 \quad \omega_7 = \omega_8 = 0 \quad . \quad (40)$$

Der Grundzustand dieses Modells ist durch Konfigurationen gegeben, bei welchem nur die Anordnungen 5 und 6 auftreten. Man erkennt, da in diesem Fall die elektrischen Dipole entlang vertikaler bzw. horizontaler Linien im Gitter im Vorzeichen alternieren.

4. BCSOS Modell:

Dieses ist äquivalent zum F Modell. Man erhält es durch eine Transformation zu "height variables" auf den Vertices. Dazu dreht man in einer Konfiguration des F Modells alle Pfeile um $+90^\circ$ und erhält so eine Konfiguration auf den Linien des dualen Gitters. Für die Anordnungen des 6-Vertex-Modells ist diese neue Konfiguration "rotationsfrei", d.h. der Fluß um jede Plakette ist 0. Man kann nun diese Konfiguration "aufintegrieren" (nicht multiplikativ wie oben, sondern additiv) und erhält eine BCSOS Konfiguration.

In Abb. a sind die sechs Möglichkeiten der Höhenfunktion um einen Vertex im BCSOS Modell skizziert. Der Wert der Plakette oben-links wurde auf 0 normiert.

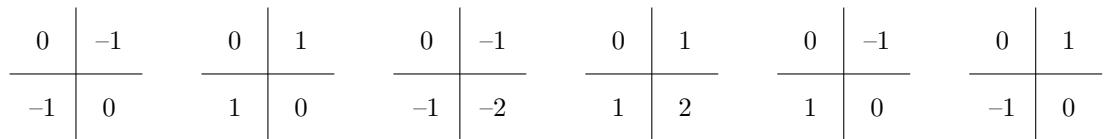


Abb. a

In Abb. b sind die entsprechenden 6-Vertex-Anordnungen aufgetragen, die man nach folgender Vorschrift erhält: man zeichne in der BCSOS-Konfiguration einen Pfeil von der tieferen zur höheren Plakette und drehe diesen um $+90^\circ$.

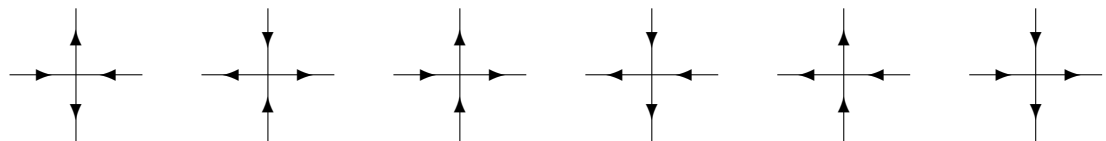


Abb. b

Die Energie im BCSOS-Modell ist für die ersten beiden Konfigurationen 0, für die anderen vier Konfigurationen $2K$. Die Gewichte sind somit vom Typ des F Modells.

5. Ashkin–Teller Modell:

Dieses Modell ist eigentlich das \mathbf{Z}_4 -Modell, es wurde allerdings schon 1943 von Ashkin und Teller formuliert. Außerdem besitzt es viele äquivalente Darstellungen, welche ebenfalls unter dem Namen Ashkin–Teller Modell bekannt sind. Es wurde schon erwähnt, daß das \mathbf{Z}_4 -Modell äquivalent ist zu zwei ungekoppelten Ising–Systemen, mit den Identifikationen der Zustände

$$(\uparrow\uparrow) \simeq (\uparrow) \quad (\uparrow\downarrow) \simeq (\rightarrow) \quad (\downarrow\downarrow) \simeq (\downarrow) \quad (\downarrow\uparrow) \simeq (\leftarrow) \quad .$$

Zum Abschluß noch eine kurze Bemerkung zu Verallgemeinerungen des 6– bzw. 8–Vertex–Modells. Die lokalen Freiheitsgrade $\{\sigma_{\langle i,j \rangle}\}$ sind immer auf den Linien des Gitters (bzw. Graphen) definiert, und das Gewicht einer Konfiguration ist das Produkt von Beiträgen der Vertices, wobei die lokalen Gewichte an einem Vertex von den lokalen Anordnungen der Freiheitsgrade an inzidenten Linien abhängen. Für Verallgemeinerungen des 6–Vertex–Modells kann man z.B. $\sigma_{\langle i,j \rangle} \in \Lambda \subset \mathbf{Z}$ wählen (für das 6–Vertex–Modell ist $\Lambda = \{+1, -1\}$) und an jedem Vertex die Bedingung $\sum_j \sigma_{\langle i,j \rangle} = 0 \quad \forall i$ fordern. Ererbungsprobleme für die Linien von Graphen lassen sich über solche verallgemeinerten Vertex–Modelle definieren: Jeder Freiheitsgrad auf einer Linie entspricht einer Farbe und es gilt die einschränkende Bedingung, daß an einem Vertex keine zwei Linien mit den selben Farben enden dürfen. In der Mathematik sind Graphen mit lokalen Freiheitsgraden auf den Linien auch als “coloured graphs” bekannt.

DIE TRANSFERMATRIX DER VERTEXMODELLE

Mehr noch als schon beim Ising–Modell hat sich der Transfermatrix–Formalismus bei den Vertex–Modellen als wesentlich für die Lösung und strukturell sehr reichhaltig erwiesen. Große Teile dieses und der weiteren Abschnitte sind einem Übersichtsartikel von DeVega entnommen [H.J. DeVega; *Yang–Baxter Algebras, Integrable Theories and Quantum Groups*, Int. Jour. Mod. Phys. A 4 (1989) 2371]. In diesem Kapitel werden wir einige algebraische Eigenschaften der Transfermatrix erarbeiten. Im letzten Kapitel wird dann kurz der Bethe–Ansatz und damit die Lösung des 6–Vertex–Modells skizziert.

In vielen der folgenden Gleichungen treten lineare Abbildungen (Matrizen) zwischen Tensorprodukten von Vektorräumen auf. Obwohl wir das übliche Skalarprodukt benutzen, ist es für die Unterscheidung mancher Formeln sinnvoll, zwischen oben– und untenstehenden Indizes an einer Matrix zu unterscheiden. Außerdem wird die Summenkonvention (über doppelt auftretende Indizes – einer oben, einer unten – ist zu summieren) benutzt.

Zur Notation:

Vektoren (z.B. Basisvektoren) werden mit unterem Index gekennzeichnet, entsprechend tragen die Komponenten eines Vektors den Index oben. Damit gilt für eine lineare Abbildung A von einem Vektorraum V (mit Basis $\{e_i\}$) in einen Vektorraum W (mit Basis $\{f_k\}$):

$$A : V \longrightarrow W \quad (Ab)^k = A_i^k b^i \quad .$$

Für die inverse Abbildung (sofern sie existiert) drehen sich entsprechend die Indizes um:

$$A^{-1} : W \longrightarrow V \quad \text{mit Komponenten} \quad (A^{-1})_k^i \quad .$$

Ist A eine Abbildung von einem Tensorprodukt $V \otimes V'$ in ein Tensorprodukt $W \otimes W'$, so ist die Notation:

$$A : V \otimes V' \longrightarrow W \otimes W' \quad \text{mit Komponenten} \quad A_j^{k k'} \quad .$$

Das Tensorprodukt von Abbildungen $A : V \rightarrow W$ und $B : V' \rightarrow W'$ ist definiert durch

$$A \otimes B : V \otimes V' \longrightarrow W \otimes W' \quad (A \otimes B)(v \otimes w) = (Av) \otimes (Bw) \quad ,$$

bzw. in Komponenten:

$$(A \otimes B)_{i i'}^{k k'} (v \otimes w)^{i i'} = (A_i^k v^i) (B_{i'}^{k'} w^{i'}) = (Av)^k (Bw)^{k'} .$$

Im folgenden wird versucht, diese Notation mglichst konsequent beizubehalten. Auerdem wird fter als vielleicht notwendig der Bild- bzw. Urbildraum explizit mit angegeben. Dies geschieht hauptsächlich deshalb, weil sich in der physikalischen Literatur teilweise eine Notation durchgesetzt hat, die zwar die Formeln optisch vereinfacht, andererseits jedoch auch zu miverstndlichen Ausdrcken fhren kann.

Wir betrachten das Vertex-Modell auf einem Gitter mit N rumlichen Gitterpunkten. Aus formalen Grnden unterscheiden wir die Konfigurationsrume fr vertikale und waagerechte Linien. Da auf jeder Linie zwei lokale Zustnde existieren knnen, sind die zugehrigen Vektorrume V bzw. W ber diesen Zustnden jeweils der \mathbb{C}^2 . Diese Vektorrume haben folgende (symbolische) Basis

$$V \simeq \{(1, 0), (0, 1)\} \simeq \{\uparrow, \downarrow\} \quad W \simeq \{(1, 0), (0, 1)\} \simeq \{\leftarrow, \rightarrow\} . \quad (41)$$

Die Transfermatrix wird jedoch nur eine Matrix im Tensorprodukt der "vertikalen" Zustnde sein:

$$T : \mathcal{H} \rightarrow \mathcal{H} \quad \mathcal{H} = \bigotimes_{i=1}^N V_i .$$

Wir stellen die Menge der vorkommenden Gewichte an einem Vertex durch eine Matrix mit vier Indizes $\alpha, \beta; a, b \in \{1, 2\}$ dar. Diese Matrix ist eine lineare Abbildung

$$t(\theta) : W \otimes V \longrightarrow W \otimes V .$$

Die Matrixelemente sind Funktionen der Temperatur bzw. der Konstanten $\{\epsilon_\alpha/kT\}$ des Modells. Diese werden wir im folgenden nicht mehr explizit angeben, bis auf eine Kurve in diesem Raum der Konstanten, die wir mit θ parametrisieren. θ ist somit eine Funktion von $\{\epsilon_\alpha/kT\}$. Die genaue Form dieser Kurve sowie die Bedeutung von θ wird spter erklrt.

Die Matrixelemente von t entsprechen den Konfigurationen an einem Vertex:

$$\begin{array}{c|c} & \alpha \\ \hline a & \\ \hline \theta & \\ \hline & \beta \end{array} \simeq t(\theta)_{b\beta}^{a\alpha} \simeq \begin{pmatrix} \omega_4 & 0 & 0 & \omega_7 \\ 0 & \omega_1 & \omega_6 & 0 \\ 0 & \omega_5 & \omega_2 & 0 \\ \omega_8 & 0 & 0 & \omega_3 \end{pmatrix} \begin{array}{c} \uparrow \leftarrow \\ \rightarrow \uparrow \\ \leftarrow \downarrow \\ \rightarrow \downarrow \\ \uparrow \leftarrow \\ \rightarrow \uparrow \\ \leftarrow \downarrow \\ \rightarrow \downarrow \end{array}$$

Die symbolische Darstellung der Basisvektoren in $V \otimes W$ wurde dabei mit angegeben. Fr den symmetrischen Fall (Gl. 38, 39) lt sich diese Matrix auch in der Form

$$t(\theta) = \sum_{\mu=0}^3 a_\mu(\theta) [\sigma_\mu \otimes \sigma_\mu] \quad \text{bzw.} \quad t(\theta)_{b\beta}^{a\alpha} = \sum_{\mu=0}^3 a_\mu(\theta) (\sigma_\mu)_b^a (\sigma_\mu)_\beta^\alpha \quad (42)$$

schreiben, dabei ist σ_0 die Identitätsmatrix und σ_i ($i = 1, 2, 3$) sind die Pauli-Matrizen. Die Koeffizienten a_μ hängen mit den Gewichten ω_α zusammen:

$$a_0 = \frac{1}{2}(\omega_1 + \omega_3) \quad a_1 = \frac{1}{2}(\omega_5 + \omega_7) \quad a_2 = \frac{1}{2}(\omega_5 - \omega_7) \quad a_3 = \frac{1}{2}(\omega_3 - \omega_1) \quad .$$

Zu zwei vertikalen "zeitlich"-benachbarten Konfigurationen definieren wir die Matrix

$$\hat{T}(\theta)_b^a : \mathcal{H} \longrightarrow \mathcal{H}$$

$$\langle \alpha_1, \dots, \alpha_N | \hat{T}(\theta)_b^a | \beta_1, \dots, \beta_N \rangle = [\hat{T}(\theta)]_b^a \{ \beta \} = \sum_{a_1, \dots, a_{N-1}} t_{a_1 \beta_1}^{a \alpha_1} t_{a_2 \beta_2}^{a_1 \alpha_2} \dots t_b^{a_{N-1} \alpha_N} \beta_N \quad , \quad (43)$$

in graphischer Darstellung

$$\begin{array}{cccccccccccc} \alpha_1 & | & \alpha_2 & | & \alpha_3 & | & \alpha_4 & | & \dots & & \alpha_{N-2} & | & \alpha_{N-1} & | & \alpha_N & | \\ a & | & a_1 & | & a_2 & | & a_3 & | & \dots & & a_{N-3} & | & a_{N-2} & | & a_{N-1} & | & b \\ \beta_1 & | & \beta_2 & | & \beta_3 & | & \beta_4 & | & \dots & & \beta_{N-2} & | & \beta_{N-1} & | & \beta_N & | \end{array}$$

die von den vier möglichen Konfigurationen $a, b = 1, 2$ auf dem Rand des räumlichen Gitters abhängt. Man kann \hat{T} somit auch als lineare Abbildung

$$\hat{T} : W \otimes \mathcal{H} \longrightarrow W \otimes \mathcal{H}$$

auffassen. Die Transfermatrix des Vertex-Modells (für periodische Randbedingungen in räumlicher Richtung) erhält man durch Spur-Bildung bzgl. W , d.h. die möglichen Zustände auf dem Rand werden identifiziert und es wird über sie summiert:

$$T(\theta) = \text{Sp}_W \hat{T}(\theta) = \sum_{a=1}^2 \hat{T}(\theta)_a^a \quad T(\theta) : \mathcal{H} \longrightarrow \mathcal{H} \quad . \quad (44)$$

Die Matrixelemente der Transfermatrix erhält man also im Vertex-Modell durch Summation über Freiheitsgrade in einem linearen Gitter (Gl.43). Man kann sich jedoch leicht überzeugen, da durch Vorgabe der Zustände $\{\alpha\}$ und $\{\beta\}$, sowie einer der Randwerte a oder b , die Zwischenzustände $\{a_i\}$ bereits festliegen, obige Summe (43) sich also auf einen einzigen Term reduziert.

R-MATRIZEN UND DIE YANG-BAXTER-GLEICHUNGEN

In diesem Abschnitt werden wir die algebraische Struktur der Transfermatrix untersuchen, die letztendlich ihre Diagonalisierung erlaubt. Wir nehmen zunächst an, es existiere eine (invertierbare) Matrix

$$R(\theta) : W \otimes W \longrightarrow W \otimes W$$

$$R(\theta)_{cd}^{ab} \simeq \begin{array}{ccc} a & & d \\ & \theta & \\ b & & c \end{array}$$

mit folgender Eigenschaft:

$$R(\theta - \theta')_{ef}^{ab} t(\theta)_{c\gamma}^{e\alpha} t(\theta')_{d\beta}^{f\gamma} = t(\theta')_{e\gamma}^{a\alpha} t(\theta)_{f\beta}^{b\gamma} R(\theta - \theta')_{cd}^{ef} \quad . \quad (45)$$

Lösungen dieser Gleichungen werden nur für ganz besondere Matrizen $t(\theta)$ existieren. Das 6- und 8-Vertex-Modell gehören dazu. Für Gleichungen dieser Art wird in der Literatur oft eine abstrakte (indexfreie) Notation benutzt:

$$R(\theta - \theta') [t(\theta) \overset{\bullet}{\otimes} t(\theta')] = [t(\theta') \overset{\bullet}{\otimes} t(\theta)] R(\theta - \theta') \quad . \quad (46)$$

Es ist diese Notation, die häufig zu Verwirrung führt. Da sie im folgenden aber häufiger verwendet wird, soll ihre Bedeutung kurz erklärt werden. " $\overset{\bullet}{\otimes}$ " bezeichnet das Tensorprodukt der Abbildungen bzgl. der Räume W , während für V normale Matrixmultiplikation angewendet wird:

$$t(\theta) \overset{\bullet}{\otimes} t(\theta') : W \otimes W \otimes V \longrightarrow W \otimes W \otimes V \quad \text{in Komponenten} \quad [t(\theta)_b^a t(\theta')_d^c]_\beta^\alpha = t(\theta)_b^{a\alpha} t(\theta')_d^{c\gamma} \cdot$$

Für festes α, β ist dies eine lineare Abbildung auf $W \otimes W$,

$$[t(\theta) \overset{\bullet}{\otimes} t(\theta')]_\beta^\alpha : W \otimes W \longrightarrow W \otimes W \quad ,$$

und Gl. 46 ist als normale Matrixmultiplikation von Abbildungen in diesem Tensorraum zu verstehen. Eine andere (äquivalente) Interpretation fasst $t(\theta)$ als Abbildung von W nach W auf — also als 2×2 -Matrix — allerdings mit Matrixelementen, die selber lineare Abbildungen sind (von V nach V):

$$t(\theta) \simeq \begin{pmatrix} A & B \\ C & D \end{pmatrix} \quad \text{mit} \quad A, B, C, D : V \longrightarrow V \quad .$$

Dann ist

$$t(\theta) \otimes t(\theta') \simeq \begin{pmatrix} AA' & AB' & BA' & BB' \\ AC' & AD' & BC' & BD' \\ CA' & CB' & DA' & DB' \\ CC' & CD' & DC' & DD' \end{pmatrix} \quad \text{und} \quad t(\theta') \otimes t(\theta) \simeq \begin{pmatrix} A'A & A'B & B'A & B'B \\ A'C & A'D & B'C & B'D \\ C'A & C'B & D'A & D'B \\ C'C & C'D & D'C & D'D \end{pmatrix} \quad ,$$

und Gl. 46 definiert quadratische Relationen zwischen den Matrixelementen A, B, C, D und A', B', C', D' , die verallgemeinerten Kommutatorrelationen von linearen Abbildungen entsprechen.

Es ist oft hilfreich, Gl. 45 durch folgendes Diagramm zu beschreiben:

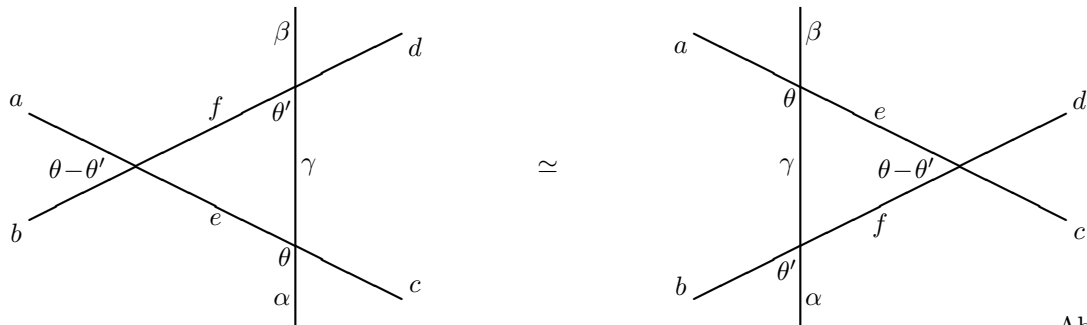


Abb.1

Innere Linien, die zwei Vertizes verbinden, tragen dabei einen Index, der summiert wird. (Die Interpretation von θ als Winkelvariable wird zwar in diesem Bild suggeriert, sollte aber nicht zu wörtlich genommen werden. θ ist eine Funktion der Kopplungen, die später aus der Analyse von Gl. 45 genauer bestimmt wird.)

Wiederholte Anwendung der Identität (45) führt zu entsprechenden Relationen für die Matrix \hat{T} :

$$R(\theta - \theta')_{ef}^{ab} [\hat{T}(\theta)_c^e \hat{T}(\theta')_d^f] = [\hat{T}(\theta')_e^a \hat{T}(\theta)_f^b] R(\theta - \theta')_{cd}^{ef} \quad \text{bzw.} \\ R(\theta - \theta')_{ef}^{ab} [\hat{T}(\theta)_c^e \hat{T}(\theta')_d^f] R^{-1}(\theta - \theta')_{gh}^{cd} = \hat{T}(\theta')_g^a \hat{T}(\theta)_h^b \quad .$$

Die Matrixmultiplikation von $\hat{T}(\theta)$ mit $\hat{T}(\theta')$ in \mathcal{H} (d.h. bezglich der Indizes $\{\alpha\}, \{\beta\}$) ist impliziert. In der indexfreien abstrakten Notation lauten diese Relationen

$$\begin{aligned} R(\theta-\theta') [\hat{T}(\theta) \overset{\bullet}{\otimes} \hat{T}(\theta')] &= [\hat{T}(\theta') \overset{\bullet}{\otimes} \hat{T}(\theta)] R(\theta-\theta') \quad \text{bzw.} \quad (47) \\ R(\theta-\theta') [\hat{T}(\theta) \overset{\bullet}{\otimes} \hat{T}(\theta')] R(\theta-\theta')^{-1} &= \hat{T}(\theta') \overset{\bullet}{\otimes} \hat{T}(\theta) \quad . \end{aligned}$$

Bilden wir die Spur in $W \otimes W$, so folgt fr die Transfermatrizen:

$$T(\theta) T(\theta') = T(\theta') T(\theta) \quad \text{bzw.} \quad [T(\theta), T(\theta')] = 0 \quad . \quad (48)$$

Entwickelt man $T(\theta')$ z.B. um $\theta' = 0$, so wird jeder Term in dieser Entwicklung mit der Transfermatrix $T(\theta)$ kommutieren. Dies ist ein erster Hinweis darauf, da das Modell integrabel ist.

Fassen wir $t(\theta)$ bzw. $\hat{T}(\theta)$ als 2×2 -Matrizen (lineare Abbildungen auf W) auf, so hatten wir schon erwht, da die Gleichungen (45, 46, 47) interpretiert werden knnen als Kommutatorrelationen (quadratische Relationen) fr die endspredhenden Matrixelemente (welche im Falle von \hat{T} lineare Abbildungen auf \mathcal{H} sind). Wir untersuchen nun, inwieweit diese Bedingungen konsistent sind in dem Sinne, da keine weiteren Relationen zwischen diesen Matrixelementen exisiteren. Dazu betrachten wir das dreifache Tensorprodukt von t -Matrizen:

$$\begin{aligned} t(\theta_1) \overset{\bullet}{\otimes} t(\theta_2) \overset{\bullet}{\otimes} t(\theta_3) &: W \otimes W \otimes W \otimes V \longrightarrow W \otimes W \otimes W \otimes V \\ [t(\theta_1) \overset{\bullet}{\otimes} t(\theta_2) \overset{\bullet}{\otimes} t(\theta_3)]_{b_1 b_2 b_3 \beta}^{a_1 a_2 a_3 \alpha} &= t(\theta_1)_{b_1 \gamma_1}^{a_1 \alpha} t(\theta_2)_{b_2 \gamma_2}^{a_2 \gamma_1} t(\theta_3)_{b_3 \beta}^{a_3 \gamma_2} \end{aligned}$$

Wir benutzen nun die quadratischen Relationen (45), um die Reihenfolge der Elemente zu vertauschen. Dazu bentigen wir eine formale Erweiterung der R -Matrizen auf das dreifache Tensorprodukt von W , und zwar definieren wir

$$\begin{aligned} R_{12} &= R \otimes \mathbb{1} : W \otimes W \otimes W \longrightarrow W \otimes W \otimes W \\ \text{und} \quad R_{23} &= \mathbb{1} \otimes R : W \otimes W \otimes W \longrightarrow W \otimes W \otimes W \quad . \end{aligned}$$

Es gilt

$$\begin{aligned} t(\theta_1) \overset{\bullet}{\otimes} t(\theta_2) \overset{\bullet}{\otimes} t(\theta_3) &= R_{23}(\theta_3-\theta_2) \left[t(\theta_1) \overset{\bullet}{\otimes} t(\theta_3) \overset{\bullet}{\otimes} t(\theta_2) \right] R_{23}^{-1}(\theta_3-\theta_2) \\ &= R_{23}(\theta_3-\theta_2) R_{12}(\theta_3-\theta_1) \left[t(\theta_3) \overset{\bullet}{\otimes} t(\theta_1) \overset{\bullet}{\otimes} t(\theta_2) \right] R_{12}^{-1}(\theta_3-\theta_1) R_{23}^{-1}(\theta_3-\theta_2) \\ &= R_{23}(\theta_3-\theta_2) R_{12}(\theta_3-\theta_1) R_{23}(\theta_2-\theta_1) \left[t(\theta_3) \overset{\bullet}{\otimes} t(\theta_2) \overset{\bullet}{\otimes} t(\theta_1) \right] R_{23}^{-1}(\theta_2-\theta_1) R_{12}^{-1}(\theta_3-\theta_1) R_{23}^{-1}(\theta_3-\theta_2) \quad . \end{aligned}$$

Whlt man die Reihenfolge der Permutationen anders, so erhlt man:

$$\begin{aligned} t(\theta_1) \overset{\bullet}{\otimes} t(\theta_2) \overset{\bullet}{\otimes} t(\theta_3) &= R_{12}(\theta_2-\theta_1) \left[t(\theta_2) \overset{\bullet}{\otimes} t(\theta_1) \overset{\bullet}{\otimes} t(\theta_3) \right] R_{12}^{-1}(\theta_2-\theta_1) \\ &= R_{12}(\theta_2-\theta_1) R_{23}(\theta_3-\theta_1) \left[t(\theta_2) \overset{\bullet}{\otimes} t(\theta_3) \overset{\bullet}{\otimes} t(\theta_1) \right] R_{23}^{-1}(\theta_3-\theta_1) R_{12}^{-1}(\theta_2-\theta_1) \\ &= R_{12}(\theta_2-\theta_1) R_{23}(\theta_3-\theta_1) R_{12}(\theta_3-\theta_2) \left[t(\theta_3) \overset{\bullet}{\otimes} t(\theta_2) \overset{\bullet}{\otimes} t(\theta_1) \right] R_{12}^{-1}(\theta_3-\theta_2) R_{23}^{-1}(\theta_3-\theta_1) R_{12}^{-1}(\theta_2-\theta_1) \quad . \end{aligned}$$

Wir erhalten also

$$\begin{aligned} R_{23}(\theta_3-\theta_2) R_{12}(\theta_3-\theta_1) R_{23}(\theta_2-\theta_1) &\left[t(\theta_3) \overset{\bullet}{\otimes} t(\theta_2) \overset{\bullet}{\otimes} t(\theta_1) \right] R_{12}^{-1}(\theta_2-\theta_1) R_{23}^{-1}(\theta_3-\theta_1) R_{12}^{-1}(\theta_3-\theta_2) \\ &= R_{12}(\theta_2-\theta_1) R_{23}(\theta_3-\theta_1) R_{12}(\theta_3-\theta_2) \left[t(\theta_3) \overset{\bullet}{\otimes} t(\theta_2) \overset{\bullet}{\otimes} t(\theta_1) \right] R_{12}^{-1}(\theta_3-\theta_2) R_{23}^{-1}(\theta_3-\theta_1) R_{12}^{-1}(\theta_2-\theta_1) \quad . \end{aligned}$$

Sollen diese (und weitere) Identitäten nicht als zusätzliche Konsistenzbedingung für die Algebra aufgenommen werden, so muß die R -Matrix die Gleichung

$$R_{23}(\theta_3 - \theta_2) R_{12}(\theta_3 - \theta_1) R_{23}(\theta_2 - \theta_1) = R_{12}(\theta_2 - \theta_1) R_{23}(\theta_3 - \theta_1) R_{12}(\theta_3 - \theta_2) \quad (49)$$

erfüllen. Diese Gleichungen heißen Yang-Baxter-Gleichungen (genauer: Quanten-Yang-Baxter-Gleichungen mit Spektralparameter θ).

LSUNGEN DER YANG-BAXTER-GLEICHUNGEN

Die Yang-Baxter-Gleichungen (49) sind hochgradig überbestimmt. Ist W ein n -dimensionaler Vektorraum, so erhält man n^6 Gleichungen für die n^4 Matrixelemente der R -Matrix. Trotzdem sind viele Lösungen bekannt. Wir werden ganz gezielt nur die Lösungen für das 6-Vertex-Modell anstreben.

Wir beobachten zunächst, daß Gl. 49 formal eine Ähnlichkeit mit Gl. 45 hat, sofern man die Abbildungen t und R geeignet identifiziert. Um diese Ähnlichkeit zu verdeutlichen, schreiben wir die Yang-Baxter-Gleichungen mit Indizes. Mit

$$[R_{12}(\theta)]_{cd}^{ab} = R(\theta)_{cd}^{ab} \delta_f^e \quad \text{und} \quad [R_{23}(\theta)]_{fcd}^{eab} = \delta_f^e R(\theta)_{cd}^{ab} \quad (50)$$

und $\theta_1 = 0, \theta_2 = \theta', \theta_3 = \theta$ erhalten wird aus der Yang-Baxter-Gleichung

$$[R_{23}(\theta - \theta')]_{gef}^{\alpha ab} [R_{12}(\theta)]_{\delta\gamma\epsilon}^{gef} [R_{23}(\theta')]_{cd\beta}^{\delta\gamma\epsilon} = [R_{12}(\theta')]_{e\gamma\epsilon}^{\alpha ab} [R_{23}(\theta)]_{\delta f g}^{e\gamma\epsilon} [R_{12}(\theta - \theta')]_{cd\beta}^{\delta f g}$$

die Gleichung:

$$R(\theta - \theta')_{ef}^{ab} R(\theta)_{c\gamma}^{\alpha e} R(\theta')_{d\beta}^{\gamma f} = R(\theta')_{e\gamma}^{\alpha a} R(\theta)_{f\beta}^{\gamma b} R(\theta - \theta')_{cd}^{ef} \quad (51)$$

Vergleich mit (45) ergibt:

$$t(\theta)_{b\beta}^{\alpha\alpha} = R(\theta)_{b\beta}^{\alpha\alpha} \quad \text{oder} \quad t(\theta) = P R(\theta) \quad (52)$$

Hierbei ist $P : W \otimes W \rightarrow W \otimes W$ mit $P(v_1 \otimes v_2) = v_2 \otimes v_1$ die Permutationsabbildung (sie vertauscht in (52) die beiden oberen Indizes), für $W = \mathbb{C}^2$ in Matrixform

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

Jede Lösung der Yang-Baxter-Gleichung liefert somit eine Lösung der Gleichung (45), und damit ein statistisches Modell mit einer Schar von kommutierenden Transfermatrizen (48). Umgekehrt können wir vermuten, daß die R -Matrix zum 6-Vertex-Modell — sofern sie überhaupt existiert — von der Form

$$R(\theta) = \begin{pmatrix} a(\theta) & 0 & 0 & 0 \\ 0 & c(\theta) & b(\theta) & 0 \\ 0 & b(\theta) & c(\theta) & 0 \\ 0 & 0 & 0 & a(\theta) \end{pmatrix} \quad (53)$$

ist. Die Yang-Baxter-Gleichungen führen zu folgenden Bedingungen für die Koeffizienten a, b, c :

$$\begin{aligned} a(\theta_2 - \theta_1) c(\theta_3 - \theta_1) a(\theta_3 - \theta_2) &= c(\theta_2 - \theta_1) a(\theta_3 - \theta_1) c(\theta_3 - \theta_2) + b(\theta_2 - \theta_1) c(\theta_3 - \theta_1) b(\theta_3 - \theta_2) \\ c(\theta_2 - \theta_1) b(\theta_3 - \theta_1) a(\theta_3 - \theta_2) &= c(\theta_2 - \theta_1) a(\theta_3 - \theta_1) b(\theta_3 - \theta_2) + b(\theta_2 - \theta_1) c(\theta_3 - \theta_1) c(\theta_3 - \theta_2) \\ a(\theta_2 - \theta_1) b(\theta_3 - \theta_1) c(\theta_3 - \theta_2) &= b(\theta_2 - \theta_1) a(\theta_3 - \theta_1) c(\theta_3 - \theta_2) + c(\theta_2 - \theta_1) c(\theta_3 - \theta_1) b(\theta_3 - \theta_2) \quad . \end{aligned}$$

Dieser Satz von Gleichungen besitzt die Lösung

$$a(\theta) = \rho \sinh(\lambda - \theta) \quad b(\theta) = \rho \sinh(\theta) \quad c(\theta) = \rho \sinh(\lambda) \quad (54)$$

für beliebige Werte für ρ und λ . Insbesondere wurde nicht benutzt, daß θ, ρ oder λ reell sind. Die einschränkenden Bedingungen sind lediglich, daß die Boltzmann-Faktoren positiv sind: $a, b, c \geq 0$. Interessant ist, daß die qualitativ verschiedenen Möglichkeiten für diese Bedingungen auch verschiedene Phasen des Modells kennzeichnen:

1. $a > b + c : \rho < 0, \theta < 0, \lambda = \lambda' + i\pi$ mit $\lambda' > 0$.

Diese Phase ist ferroelektrisch. Parallele Pfeile zeigen überwiegend in dieselbe Richtung. Dominant sind die Konfigurationen 1 oder 2, d.h. entweder zeigen die waagerechten Pfeile überwiegend nach rechts und die senkrechten überwiegend nach oben oder die waagerechten zeigen nach links und die senkrechten nach unten.

2. $b > a + c : \rho < 0, \theta = \theta' + i\pi, \lambda = \lambda' + i\pi$ mit $\lambda', \theta' > 0$.

Diese Phase ist äquivalent zu Phase 1, insbesondere ebenfalls ferroelektrisch, allerdings überwiegend jetzt die Konfigurationen 3 und 4, das bedeutet z.B. daß die senkrechten Pfeile nach unten zeigen falls die waagerechten überwiegend nach rechts zeigen bzw. entsprechend umgekehrt.

3. $a + b > c > |a - b| : \rho = -i\rho', \theta = i\theta', \lambda = i\lambda'$ wobei $\rho' > 0, \pi > \lambda' > |2\theta' - \lambda'|$.

Die Konfigurationen sind ungeordnet, d.h. die Korrelationen in dieser Phase gehen gegen 0 für große Abstände, allerdings nur wie eine Potenz. Das Modell ist für diese Parameterwerte "kritisch", mit Phasenübergängen zu den Nachbarbereichen vom Kosterlitz-Thouless Typ.

4. $c > a + b : \rho > 0, \theta > 0, \lambda > 0$.

Diese Phase ist anti-ferroelektrisch (ähnlich dem F Modell), d.h. die Pfeile entlang gerader Linien des Gitters wechseln ihre Richtung überwiegend alternierend.

Die entsprechenden Gleichungen für das 8-Vertex-Modell sind erheblich komplizierter. Die Lösungen lassen sich durch elliptische Funktionen ausdrücken. Phase 3 erscheint im 8-Vertex-Modell als "kritischer Punkt" der Temperatur.

DIE ÄQUIVALENZ DER VERTEX-MODELLE MIT QUANTENSPIKETTEN

In diesem Abschnitt soll gezeigt werden, daß die Transfermatrix des 8-Vertex-Modells dieselben Eigenvektoren hat wie der Hamilton-Operator H des XYZ-Modells. Dazu zeigen wir zunächst, daß die Transfermatrix für $\theta \rightarrow 0$ in linearer Ordnung in θ im wesentlichen gleich H ist.

Wir benötigen für diesen Beweis lediglich folgende Eigenschaften der Matrix $t(\theta)$:

$$t(0) = cP = c \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \quad \text{bzw.} \quad t(0)_{\beta}^{\alpha} = c \delta_{\beta}^{\alpha} \delta_{\beta}^{\alpha}$$

$$\text{und} \quad \left. \frac{\partial t(\theta)}{\partial \theta} \right|_{\theta=0} = \sum_{\mu=0}^3 c_{\mu} [\sigma_{\mu} \otimes \sigma_{\mu}] \quad (55)$$

Die erste Eigenschaft gilt für jede Lösung, die von einer R -Matrix mit $R(0) = c\mathbb{1}$ herrührt. Die zweite Eigenschaft gilt für jede t -Matrix der Form (42). Wichtig ist jedoch, daß zwei der Parameter c_i frei gewählt werden können.

Für die Transfermatrix (43,44) erhalten wir

$$T(0) = c^N \hat{P} \quad \text{mit} \quad \hat{P}_{\{\beta\}}^{\{\alpha\}} = \delta_{\beta_2}^{\alpha_1} \delta_{\beta_3}^{\alpha_2} \dots \delta_{\beta_N}^{\alpha_{N-1}} \delta_{\beta_1}^{\alpha_N} .$$

Diese Matrix ist der Translations-Operator, der das Gitter um eine Einheit verschiebt. Eine Translation läßt die Transfermatrix invariant, was eine spezielle Folgerung aus Gl. 48 ist. Die Ableitung der Transfermatrix ist

$$\begin{aligned} \left. \frac{\partial T(\theta)}{\partial \theta} \right|_{\theta=0} &= \sum_{k=1}^N \sum_{\{a_i\}} t(\theta)_{a_1 \beta_1}^{\alpha_1} \dots \left. \frac{\partial t(\theta)_{a_k \beta_k}^{\alpha_{k-1} \alpha_k}}{\partial \theta} \right|_{\theta=0} \dots t(\theta)_{a_N \beta_N}^{\alpha_{N-1} \alpha_N} \Big|_{\theta=0} \\ &= \sum_{k=1}^N \delta_{\beta_1}^{\alpha_N} \delta_{\beta_2}^{\alpha_1} \dots \delta_{\beta_{k-1}}^{\alpha_{k-2}} \left(\frac{\partial t(\theta)}{\partial \theta} \right)_{\beta_{k+1} \beta_k}^{\alpha_{k-1} \alpha_k} \Big|_{\theta=0} \delta_{\beta_{k+2}}^{\alpha_{k+1}} \dots , \end{aligned}$$

bzw.

$$T(\theta)^{-1} \left. \frac{\partial T(\theta)}{\partial \theta} \right|_{\theta=0} = \sum_{k=1}^N \delta_{\beta_1}^{\alpha_1} \delta_{\beta_2}^{\alpha_2} \dots \delta_{\beta_{k-1}}^{\alpha_{k-1}} \left(\frac{\partial t(\theta)}{\partial \theta} \right)_{\beta_{k+1} \beta_k}^{\alpha_k \alpha_{k+1}} \Big|_{\theta=0} \delta_{\beta_{k+2}}^{\alpha_{k+2}} \dots .$$

Dabei ist

$$\left(\frac{\partial t(\theta)}{\partial \theta} \right)_{\beta_{k+1} \beta_k}^{\alpha_k \alpha_{k+1}} \Big|_{\theta=0} = \left(\frac{\partial t(\theta)}{\partial \theta} P \right)_{\beta_k \beta_{k+1}}^{\alpha_k \alpha_{k+1}} \Big|_{\theta=0} = \sum_{\mu=0}^3 J_\mu [\sigma_\mu \otimes \sigma_\mu]_{\beta_k \beta_{k+1}}^{\alpha_k \alpha_{k+1}} ,$$

wobei J_μ Linearkombinationen der c_μ aus (55) sind:

$$\begin{aligned} J_0 &= \frac{1}{4} (c_0 + c_1 + c_2 + c_3) & J_1 &= \frac{1}{4} (c_0 + c_1 - c_2 - c_3) \\ J_2 &= \frac{1}{4} (c_0 - c_1 + c_2 - c_3) & J_3 &= \frac{1}{4} (c_0 - c_1 - c_2 + c_3) . \end{aligned}$$

Mit der Notation aus Kapitel 6 für die Quantenspinketten folgt

$$T(\theta)^{-1} \left. \frac{\partial T(\theta)}{\partial \theta} \right|_{\theta=0} = N J_0 \mathbb{1} + \sum_{k=1}^N \left[\sum_{i=1}^3 J_i \Sigma_i(k) \Sigma_i(k+1) \right] . \quad (56)$$

Wir erhalten den Hamilton-Operator der XYZ-Quantenspinkette (Gl. 27). Da Transfermatrizen zu verschiedenen Werten von θ miteinander kommutieren, folgt

$$[T(\theta), H(\{J_i\})] = 0 ,$$

d.h. die Transfermatrizen und der Hamilton-Operator der XYZ-Kette haben dieselben Eigenvektoren. Insbesondere gilt für das 6-Vertex-Modell

$$\frac{\partial t(\theta)}{\partial \theta} P = \rho \begin{pmatrix} \cosh \lambda & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \cosh \lambda \end{pmatrix} = \frac{\rho}{2} \cosh \lambda [\mathbb{1} \otimes \mathbb{1} + \sigma_3 \otimes \sigma_3] + \frac{\rho}{2} [\sigma_1 \otimes \sigma_1 + \sigma_2 \otimes \sigma_2] ,$$

und damit

$$T(\theta)^{-1} \left. \frac{\partial T(\theta)}{\partial \theta} \right|_{\theta=0} = N \frac{\rho}{2} \cosh \lambda \mathbb{1} \quad (57)$$

$$+ \frac{\rho}{2} \sum_{k=1}^N [\Sigma_1(k) \Sigma_1(k+1) + \Sigma_2(k) \Sigma_2(k+1) + \cosh \lambda \Sigma_3(k) \Sigma_3(k+1)] .$$

Das 6-Vertex-Modell ist also äquivalent zur XXZ-Quantenspin-kette.

0.10 Der Bethe-Ansatz für das 6-Vertex-Modell

In diesem Kapitel wird die Lösung des 6-Vertex-Modells mit Hilfe des Bethe-Ansatzes in groben Zügen skizziert. Nach einem kurzen Abschnitt über die Symmetrien des 6-Vertex-Modells werden wir zunächst den sogenannten algebraischen Bethe-Ansatz behandeln, welcher die Struktur der Transfermatrix, wie sie im letzten Kapitel erörtert wurde, ausnutzt. Nähere Details zu diesem Lösungsweg findet man z.B. in dem schon erwähnten Übersichtsartikel von DeVega. Im letzten Abschnitt wird dann kurz der ursprünglich von Bethe zur Lösung der XXZ-Quantenspin-kette benutzte Ansatz diskutiert. Näheres dazu findet man unter anderem in dem Buch von Baxter, bzw. auch in dem sehr lesbaren Originalartikel von Bethe. Beide Verfahren führen natürlich zu denselben Lösungen, benutzen aber eine unterschiedliche anschauliche Interpretation.

SYMMETRIEN DES 6-VERTEX-MODELLS

Als Vorarbeit für das Verständnis des algebraischen Bethe-Ansatzes wollen wir zunächst die Symmetrien der Transfermatrix des 6-Vertex-Modells bzw. der XXZ-Quantenspin-kette näher untersuchen. Die Gruppe $U(1)$ in der Darstellung

$$G = g \otimes g \otimes \dots \otimes g \quad \text{mit} \quad g = e^{i\alpha\sigma_3} \quad \text{bzw.} \quad G = \exp\left(i\alpha \sum_{k=1}^N \Sigma_3(k)\right) ,$$

ist eine Invarianzgruppe des XXZ-Hamiltonians

$$H = \frac{1}{2} \sum_{k=1}^N [\Sigma_1(k) \Sigma_1(k+1) + \Sigma_2(k) \Sigma_2(k+1) + \cosh \lambda \Sigma_3(k) \Sigma_3(k+1)] , \quad (58)$$

d.h. es gilt $[H, G] = 0$. Dies folgt aus den Transformationsformeln

$$\begin{aligned} e^{i\alpha\sigma_3} \sigma_1 e^{-i\alpha\sigma_3} &= \sigma_1 \cos \alpha - \sigma_2 \sin \alpha \\ e^{i\alpha\sigma_3} \sigma_2 e^{-i\alpha\sigma_3} &= \sigma_1 \sin \alpha + \sigma_2 \cos \alpha \\ \implies e^{i\alpha\sigma_3} \otimes e^{i\alpha\sigma_3} [\sigma_1 \otimes \sigma_1 + \sigma_2 \otimes \sigma_2] e^{-i\alpha\sigma_3} \otimes e^{-i\alpha\sigma_3} &= [\sigma_1 \otimes \sigma_1 + \sigma_2 \otimes \sigma_2] , \\ \text{und} \quad e^{i\alpha\sigma_3} \sigma_3 e^{-i\alpha\sigma_3} &= \sigma_3 . \end{aligned}$$

Der Generator dieser Invarianz ist somit eine "erhaltene Größe":

$$\hat{N} = \sum_{k=1}^N \Sigma_3(k) \simeq n^+ - n^- , \quad (59)$$

dabei sind n^+ bzw. n^- die Anzahl der “up” bzw. “down” Spins in einer Konfiguration.

Die Transfermatrix des 6-Vertex-Modells hat dieselben Eigenvektoren wie H , daher kommutiert die Transfermatrix des 6-Vertex-Modells ebenfalls mit \hat{N} . Es ist instruktiv, die Tranformationseigenschaften von $\hat{T}(\theta)$ genauer zu untersuchen. Sei

$$\hat{T}(\theta) = \begin{pmatrix} A(\theta) & B(\theta) \\ C(\theta) & D(\theta) \end{pmatrix} \quad \text{mit} \quad A(\theta), B(\theta), \dots = \hat{T}(\theta)_1^1, \hat{T}(\theta)_2^1, \dots : \mathcal{H} \rightarrow \mathcal{H} . \quad (60)$$

Diese Abbildungen ergeben sich nach (Gl. 42) aus der Matrix

$$\begin{aligned} t(\theta) &= \begin{pmatrix} a(\theta) & 0 & 0 & 0 \\ 0 & b(\theta) & c(\theta) & 0 \\ 0 & c(\theta) & b(\theta) & 0 \\ 0 & 0 & 0 & a(\theta) \end{pmatrix} \\ &= \frac{a(\theta) + b(\theta)}{2} \mathbb{1} \otimes \mathbb{1} + \frac{a(\theta) - b(\theta)}{2} \sigma_3 \otimes \sigma_3 + c(\sigma^+ \otimes \sigma^- + \sigma^- \otimes \sigma^+) , \end{aligned}$$

$$\text{mit} \quad \sigma^+ = \frac{1}{2}(\sigma_1 + i\sigma_2) = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \quad \text{und} \quad \sigma^- = \frac{1}{2}(\sigma_1 - i\sigma_2) = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} .$$

Fr $\hat{T}(\theta)$ hat man das N -fache Matrixprodukt bezglich der ersten Tensorfaktoren in $t(\theta)$ zu bilden und das N -fache Tensorprodukt bezglich der zweiten Faktoren. Da

$$(\sigma^+)^2 = (\sigma^-)^2 = 0 \quad \text{und} \quad \sigma^+ \sigma^- = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \quad \text{bzw.} \quad \sigma^- \sigma^+ = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} ,$$

lassen sich die Anteile A, B, C, D leicht charakterisieren: A und D enthalten solche Produkte, in welchen σ^+ bzw. σ^- gar nicht auftreten, oder aber in der Kombination $\sigma^+ \sigma^-$ bzw. $\sigma^- \sigma^+$. B enthl alle Terme, in welchen σ^+ (ohne σ^-) auftritt, C entsprechend alle Terme in welchen σ^- (ohne σ^+) einmal auftritt. Wegen

$$\begin{aligned} e^{i\alpha\sigma_3} \sigma^+ e^{-i\alpha\sigma_3} &= \sigma^+ e^{i\alpha} \\ \text{und} \quad e^{i\alpha\sigma_3} \sigma^- e^{-i\alpha\sigma_3} &= \sigma^- e^{-i\alpha} \\ \text{bzw.} \quad [\sigma_3, \sigma^+] &= \sigma^+ \quad \text{und} \quad [\sigma_3, \sigma^-] = -\sigma^- , \end{aligned}$$

folgt:

$$\begin{aligned} [\hat{N}, A(\theta)] &= [\hat{N}, D(\theta)] = 0 \\ \text{und} \quad [\hat{N}, B(\theta)] &= -B(\theta) \quad , \quad [\hat{N}, C(\theta)] = C(\theta) . \end{aligned}$$

Die Transfermatrix $T(\theta) = A(\theta) + D(\theta)$ kommutiert also mit \hat{N} , whrend $B(\theta)$ als Absteigeoperator und $C(\theta)$ als Aufsteigeoperator zu Eigenrumen von \hat{N} aufgefat werden knnen.

Die Zustnde

$$|\Omega^+\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}_1 \otimes \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}_2 \otimes \dots \otimes \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}_N \quad (61)$$

$$\text{und} \quad |\Omega^-\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}_1 \otimes \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}_2 \otimes \dots \otimes \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}_N \quad |\Omega^\pm\rangle \in \mathcal{H} \quad (62)$$

sind Eigenzustände von \hat{N} mit nichtentarteten Eigenwerten $+N$ bzw. $-N$.

Das 6-Vertex-Modell besitzt noch eine diskrete \mathbf{Z}_2 Symmetrie in der Darstellung

$$\mathbf{Z}_2 \simeq \{ \mathbb{1} \otimes \mathbb{1} \otimes \dots \otimes \mathbb{1}, \sigma_3 \otimes \sigma_3 \otimes \dots \otimes \sigma_3 \} .$$

Als Symmetriegruppe des 6-Vertex-Modells bzw. der XXZ-Quantenspinkette findet man somit $U(1) \times \mathbf{Z}_2$. Für $\lambda = 1$ — also die XXX-Quantenspinkette \simeq Heisenberg Quantenspinkette bzw. das Eis-Modell — erhöht sich diese Symmetriegruppe zu $SU(2)$. Vom Standpunkt der Vertex-Modelle mit ihren diskreten lokalen Zuständen ist es zunächst erstaunlich, da eine kontinuierliche Symmetriegruppe existiert.

DER ALGEBRAISCHE BETHE-ANSATZ

Wie schon erwähnt, führen die algebraischen Relationen für $\hat{T}(\theta)$ (45) zu Kommutatorrelationen der Matrixelemente, z.B.

$$A(\theta)B(\theta') = g(\theta' - \theta) B(\theta')A(\theta) - h(\theta' - \theta) B(\theta)A(\theta') \quad (63)$$

$$D(\theta)B(\theta') = g(\theta - \theta') B(\theta')D(\theta) - h(\theta - \theta') B(\theta)D(\theta') \quad (64)$$

$$B(\theta)B(\theta') = B(\theta')B(\theta) \quad \text{etc.} \quad , \quad (65)$$

mit

$$g(\theta) = \frac{a(\theta)}{b(\theta)} = \frac{\sinh(\lambda - \theta)}{\sinh \theta} \quad \text{und} \quad h(\theta) = \frac{c(\theta)}{b(\theta)} = \frac{\sinh(\lambda)}{\sinh \theta} . \quad (66)$$

Nach den Überlegungen des letzten Abschnitts sind die Vektoren $|\Omega^+\rangle$ bzw. $|\Omega^-\rangle$ Eigenvektoren zu $A(\theta)$ und $D(\theta)$:

$$\begin{aligned} A(\theta)|\Omega^+\rangle &= a(\theta)^N |\Omega^+\rangle & D(\theta)|\Omega^+\rangle &= b(\theta)^N |\Omega^+\rangle \\ A(\theta)|\Omega^-\rangle &= b(\theta)^N |\Omega^-\rangle & D(\theta)|\Omega^-\rangle &= a(\theta)^N |\Omega^-\rangle . \end{aligned} \quad (67)$$

Außerdem gilt

$$C(\theta)|\Omega^+\rangle = 0 \quad \text{bzw.} \quad B(\theta)|\Omega^-\rangle = 0 . \quad (68)$$

$B(\theta)$ angewandt auf $|\Omega^+\rangle$ (entsprechend $C(\theta)$ angewandt auf $|\Omega^-\rangle$) generieren unabhängige Vektoren. Diese Situation erinnert an eine freie Feldtheorie, wo die Algebra der Auf- und Absteigeoperatoren (die Fourier-Moden der Feldoperatoren) genutzt wird, um aus dem Grundzustand des Hamilton-Operators (dem Vakuum) die weiteren Eigenzustände zu erzeugen.

Im folgenden wird $|\Omega^+\rangle$ als ‘‘Grundzustand’’ gewählt, von dem aus durch sukzessive Anwendung von $B(\theta_i)$ der Vektorraum \mathcal{H} erzeugt wird. Der algebraische Bethe-Ansatz besteht darin, nach Lösungen der Eigenwertgleichung für die Transfermatrix zu suchen, welche die folgende Form haben:

$$|\theta_1, \theta_2, \dots, \theta_r\rangle = B(\theta_1) B(\theta_2) \dots B(\theta_r) |\Omega^+\rangle . \quad (69)$$

Im allgemeinen werden diese Vektoren keine Eigenvektoren von $T(\theta)$ sein. Wendet man $T(\theta)$ auf einen Zustand der Form (69) an und benutzt die Beziehungen (63,64) um $T(\theta)$ bis zum Grundzustand durchzukommutieren, so erhält man zwar als erwünschten Term einen Anteil proportional zu (69), allerdings auch ‘‘unerwünschte’’ Terme, die von dem zweiten Anteil in (63,64) herrühren. Diese unerwünschten

Terme heben sich jedoch weg, falls die “Impulse” $\{\theta_i\}$ einem Satz von “Quantisierungsbedingungen” genügen, welche Bethe-Ansatz-Gleichungen genannt werden:

$$g(\theta_k)^N = \prod_{i \neq k} \frac{g(\theta_k - \theta_i)}{g(\theta_i - \theta_k)} \quad \forall 1 \leq k \leq r \quad . \quad (70)$$

Diese Gleichungen sind vergleichbar mit den Quantisierungsbedingungen fr die erlaubten Impulse eines Teilchens in einem Kasten, oder den Bedingungen fr Schwingungsfrequenzen bei einer endlichen linearen Kette. Im Grenzfall $N \rightarrow \infty$ fhren die Gleichungen (70) — genauer der Logarithmus dieser Gleichungen — zu einer Integralgleichung fr die Spektraldichte der θ -Werte.

Die zugehrigen Eigenwerte der Transfermatrix $T(\theta)$ sind

$$\Lambda_r(\theta, \{\theta_i\}) = a(\theta)^N \prod_{i=1}^r g(\theta_i - \theta) + b(\theta)^N \prod_{i=1}^r g(\theta - \theta_i) \quad .$$

Im thermodynamischen Grenzfall $N \rightarrow \infty$ lassen sich die Gleichungen (70) nicht allgemein fr beliebige Werte von r lsen. In den Phasen 1 und 2 (nach der Klassifikation des letzten Kapitels) wird der maximale Eigenwert (der zweifach entartet ist) jedoch fr $r = 0$ und $r = N$ angenommen, mit den Eigenvektoren $|\Omega^+\rangle$ sowie $|\Omega^-\rangle$.

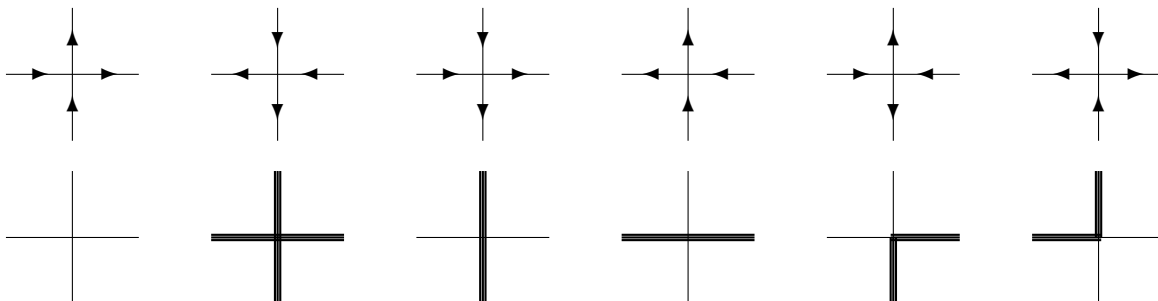
In den Phasen 3 und 4 wird der maximale Eigenwert fr $r = N/2$ angenommen und ist in diesem Spezialfall darstellbar als Integral bzw. Summe ber bekannte Funktionen. So erhlt man fr die freie Energie des 6-Vertex-Modells (mit den Parametrisierungen des letzten Kapitels):

$$\begin{aligned} \text{Phase 3} \quad f_3 &= \epsilon_1 - \frac{1}{\beta} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\sinh 2\theta' x \sinh(\pi - \lambda') x}{2x \sinh \pi x \cosh \lambda' x} dx \\ \text{Phase 4} \quad f_4 &= \epsilon_1 - \frac{1}{\beta} \left(\theta + \sum_{m=1}^{\infty} \frac{e^{-m\lambda} \sinh 2m\theta}{m \cosh m\lambda} \right) , \end{aligned}$$

(ϵ_1 ist die Energie der Konfiguration vom Typ 1 (Gl. 36)).

DER BETHE-ANSATZ FÜR DIE WELLENFUNKTION

Wir reformulieren zunächst das 6-Vertex-Modell als ein statistisches Modell von Wegen mit bestimmten Charakteristiken. Dazu “färben” wir die Linien eines quadratischen Gitters für eine Konfiguration des 6-Vertex-Modells nach folgender Vorschrift ein: jede waagerechte Linie mit einem Pfeil nach links sowie jede senkrechte Linie mit einem nach unten gerichteten Pfeil wird markiert:



Die Konfiguration vom Typ 2 wird interpretiert als Berührungspunkt zweier Wege: ein Weg läuft von unten in den Vertex ein und biegt nach rechts ab, der zweite Weg läuft von links ein und biegt nach oben ab. Damit führt jede erlaubte Konfiguration des 6-Vertex-Modells zu einer Konfiguration von Wegen auf einem quadratischen Gitter mit folgenden Eigenschaften:

Wege verlaufen nur von unten nach oben, sowie von links nach rechts. (Ein Weg, der von unten kommt, kann nicht nach links abbiegen, und ein Weg von links kann nicht nach unten abbiegen.) Zwei Wege können sich zwar treffen (Typ 2), aber schneiden sich nicht. Außerdem haben Wege keine Anfangs- und Endpunkte. Umgekehrt führt jede Anordnung von Wegen mit obigen Eigenschaften wieder eindeutig zu einer 6-Vertex-Konfiguration.

Dreht man das gesamte Gitter um -45° (man erhält dann ein sogenanntes “Lichtkegelgitter”), so laufen Wege von unten nach oben (in positive “Zeit”-Richtung) und schneiden sich nicht, ähnlich wie Teilchen mit einem harten Kern in einer Raumdimension.

Für die N Vertices entlang einer waagerechten Linie — (auf einem raumartigen Gitter) — ist die Anzahl der ein- und auslaufenden Wege gleich. Dies entspricht dem Erhaltungssatz für \hat{N} . Bei Vorgabe der ein- und auslaufenden Wege auf den senkrechten Linien liegt die Konfiguration an den waagerechten Linien fest. In der durch (Gl. 40) induzierten Standardbasis von \mathcal{H} entsprechen Wegen genau senkrechte Gitterlinien mit nach unten gerichteten Spins. Statt nun anzugeben, welche Spins nach oben und welche nach unten gerichtet sind, wählen wir folgende Konvention für die Basisvektoren in dem Sektor von \mathcal{H} mit r nach unten gerichteten Spins (wir werden oft vom “ r -Teilchen-Sektor” sprechen): Seien $1 \leq n_1 < n_2 < \dots < n_r \leq N$ die Positionen der down-Spins, so ist

$$|n_1, n_2, \dots, n_r\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}_1 \otimes \dots \otimes \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}_{n_1} \otimes \dots \otimes \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}_{n_r} \otimes \dots \otimes \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}_N .$$

Eine Vorgabe von r verschiedenen natürlichen Zahlen ($\leq N$), aufsteigend geordnet, definiert eindeutig einen Basisvektor.

Die weiteren Rechnungen unterscheiden sich in Details für das 6-Vertex-Modell und die XXZ-Quantenspin-Kette, führen jedoch zu denselben Eigenvektoren für beide Modelle. Daher konzentrieren wir uns im folgenden auf die Bestimmung der Eigenvektoren für das XXZ-Modell. Da die Anzahl der down-Spins (Wege bzw. Teilchen) erhalten bleibt, wird die Eigenwertgleichung

$$H|\psi\rangle = E|\psi\rangle$$

in einem Sektor zu einer Gleichung fr die Koeffizienten $a(n_1, \dots, n_r)$ eines Vektors

$$|\psi_r\rangle = \sum_{1 \leq n_1 < \dots < n_r \leq N} a(n_1, n_2, \dots, n_r) |n_1, n_2, \dots, n_r\rangle .$$

Im 1-Teilchen-Sektor erhlt man z.B.

$$\left(-\frac{N-4}{2} \cosh \lambda + E \right) a(n) = a(n+1) + a(n-1) . \quad (71)$$

Die Lsungen erhlt man durch Fourierentwicklung:

$$a_k(n) = e^{ikn} \quad \text{mit} \quad k = \frac{2\pi\gamma}{N} \quad 1 \leq \gamma \leq N ,$$

mit den zugehrigen Eigenwerten

$$E(k) = \frac{N-4}{2} \cosh \lambda + 2 \cos k .$$

Gleichung (71) einspricht einer diskretisierten Schrdingergleichung fr ein freies Teilchen (in konstantem Potential).

Im 2-Teilchensektor ist zu unterscheiden, ob die beiden Teilchen (down-Spins) benachbart sind oder nicht. So gilt

$$H|n_1, n_2\rangle = \frac{N-8}{2} \cosh \lambda |n_1, n_2\rangle + |n_1-1, n_2\rangle + |n_1+1, n_2\rangle + |n_1, n_2-1\rangle + |n_1, n_2+1\rangle ,$$

falls $n_2 \neq n_1 + 1$, anderenfalls erhlt man

$$H|n, n+1\rangle = \frac{N-4}{2} \cosh \lambda |n, n+1\rangle + |n-1, n+1\rangle + |n, n+2\rangle .$$

Ganz allgemein gilt:

$$\begin{aligned} H|n_1, n_2, \dots, n_r\rangle &= \frac{N-4r+4p}{2} \cosh \lambda |n_1, n_2, \dots, n_r\rangle \\ &+ \sum_{k=1}^{r*} (|n_1, \dots, n_k+1, \dots, n_r\rangle + |n_1, \dots, n_k-1, \dots, n_r\rangle) , \end{aligned}$$

dabei ist p die Anzahl der direkt benachbarten Paare von Teilchen und die Summe \sum^* erstreckt sich nur ber solche Terme, fr die keine unerlaubten Teilchenpositionen entstehen, d.h. Terme mit $n_k+1 = n_{k+1}$ oder $n_k-1 = n_{k-1}$ sind wegzulassen. Man erkennt, da die Eigenwertgleichung wiederum einer diskretisierten Schrdingergleichung fr r Teilchen entspricht, die jedoch eine Wechselwirkung haben, falls sie auf benachbarten Gitterpunkten sind, ansonsten verhalten sie sich wie freie Teilchen.

Der Bethe-Ansatz fr die Koeffizientenfunktionen $a(n_1, \dots, n_r)$ ist nun der folgende Ausdruck:

$$a(n_1, n_2, \dots, n_r) = \sum_{\sigma \in S_r} A[\sigma; \{k_i\}] \exp \left(i \sum_{i=1}^r k_{\sigma(i)} n_i \right) , \quad (72)$$

wobei S_r die Permutationsgruppe von r Elementen ist. Das Besondere an diesem Ansatz ist, da nicht über alle möglichen Werte für k_i summiert wird, sondern ein Satz $\{k_1, \dots, k_r\}$ festgehalten wird und lediglich über die Permutationen summiert wird. Die "Impulse" der Teilchen liegen also fest, lediglich die Zuordnung der einzelnen Impulse zu den einzelnen Teilchen wird unterschiedlich gewichtet.

Eine Kontinuumsversion dieses Systems von Spins auf einem Gitter ist die r -Teilchen Schrödinger-Gleichung für Teilchen mit δ -Potential. Diese ist ebenfalls durch den Bethe-Ansatz lösbar ist. (äquivalent ist die sogenannte "nichtlineare" Schrödinger-Gleichung als Quantenfeldgleichung).

Zum Verständnis des Bethe-Ansatzes kann man sich klassisch r Teilchen auf einem kreisförmigen, geschlossenen Draht vorstellen, die bei Stoß elastisch wechselwirken. Energie- und Impulserhaltung bedeuten für einen elastischen Stoß in einer Dimension, da Impulse nur ausgetauscht werden. Beginnt man mit einem Satz von Impulsen für diese Teilchen $\{k_1, \dots, k_r\}$, so ändern sich diese Impulswerte im Laufe der Zeit nicht, nur die jeweiligen Träger der Impulse. Sucht man für das entsprechende Quantensystem nach einer Eigenfunktion der Energie, so wird man eine Überlagerung dieser Zustände vermuten, was genau dem Bethe-Ansatz entspricht.

Für einen allgemeinen Satz von $\{k_i\}$ wird dieser Ansatz keine Lösung der Eigenwertgleichung liefern. Man erhält Quantisierungsbedingungen an den Satz möglicher Impulse, welche genau die Bethe-Ansatz-Gleichungen sind (Gl. 70). Für erlaubte komplexe Werte von λ existieren auch sogenannte gebundene Zustände, für welche die Lösungen der Bethe-Ansatz-Gleichungen imaginäre Werte für $\{k_i\}$ liefern.

Die Koeffizienten in (72) für verschiedene Permutationen σ unterscheiden sich nur um eine Phase:

$$\frac{A[\sigma; \{k_i\}]}{A[\sigma'; \{k_i\}]} = e^{i\varphi(\sigma, \sigma'; \{k_i\})} \quad .$$

Dies ist eine Verallgemeinerung der bekannten Formen von Statistik: für Zustände von Bosonen führt die Permutation der Teilchen zu identischen Vektoren im Hilbertraum, für Fermionen zu Vektoren, die sich um ein Vorzeichen unterscheiden können (je nach dem Grad der Permutation). Hier hat man es mit "Teilchen" zu tun, die einer verallgemeinerten Form von Statistik gehorchen, sogenannten "Anyonen". Theorien für solche Teilchen sind nur in 1+1-dimensionalen Modellen (bzw. bei relativistischen Theorien in 2+1 Dimensionen) konsistent.