Mathematische Modelle der Statistischen Physik und Quantenfeldtheorie

Inhalt

Literatur

R.J. Baxter, *Exactly solved models in statistical mechanics*

J. Glimm & A. Jaffe. *Quantum physics. A functional integral point of view*

H. Grosse, *Models in statistical physics and quantum field theory*

C. Itzykson & J.-M. Drouffe, *Statistical field theory*

B.M. McCoy & T.T. Wu, *The two-dimensional Ising model*

M. Reed B. Simon, *Methods of modern mathematical physics. Bd I: Functional analysis. Bd II: Fourier analysis and self-adjointness. Bd IV: Analysis of operators*

H.E. Stanley, *Introduction to phase transitions and critical phenomena*

R.F. Streater & A.S. Wightman, *PCT, spin and statistics, and all that*

F. Strocchi, *Selected topics on the general properties of quantum field theory*

F. Strocchi, *An introduction to the mathematical structure of quantum mechanics*

L.A. Takhtajan, *Quantum mechanics for mathematicians*

W. Thirring, *Lehrbuch der Mathematischen Physik. 3.*

K.G. Wilson & J.B. Kogut, "The renormalization group and the epsilon expansion"

J. Zinn-Justin, *Quantum field theory and critical phenomena*

0 Überblick

In der Quantenfeldtheorie und Statistischen Physik geht es um Systeme mit unendlich vielen Freiheitsgraden. Ziel ist die Konstruktion von Funktionen, die einen Grenzwert besitzen, wenn möglich auch die Berechnung der Grenzwerte. Die dabei entwickelten Methoden haben sich als äußerst fruchtbar in Mathematik und Physik erwiesen.

0.1 Historische Anmerkungen

Statistische Physik

1859 Maxwell: Geschwindigkeitsverteilung der Gasmoleküle

1872 Boltzmann: statistische Beschreibung der Entropie, Boltzmann-Verteilung

1900 Planck: Quantenhypothese und Strahlungsgesetz

1902 Gibbs: Statistische Physik

1925 Ising: Lösung des eindimensionalen Ising-Modells

1931 Bethe: Lösungsansatz für eindimensionale Quantenmodelle

1944 Onsager: Lösung des zweidimensionalen Ising-Modells

1966 Kadanoff: Block-Spins

1967 Lieb: Lösung des 6-Vertex-Modells (Eismodell)

1970 Wilson: Renormierungsgruppe, ϵ-Entwicklung, kritische Exponenten

1971 Baxter: Lösung des 8-Vertex-Modells

Quantenfeldtheorie

1905 Einstein: Spezielle Relativitätstheorie

1907 Minkowski: vierdimensionale Raum-Zeit

1925 Heisenberg; Born, Jordan: Matrizenmechanik

1926 Schrödinger: Quantisierung als Eigenwertproblem

1927 Pauli: Spin

1928 Dirac: relativistische Gleichung, Spin, Antiteilchen

1932 von Neumann: Mathematik der Quantenmechanik

1936 Murray, von Neumann: Operatoralgebren

1947 Lamb: Verschiebung der Spektrallinien (Experiment)

1948 Feynman, Schwinger, Tomonaga, Dyson: Quantenelektrodynamik und Renormierung

1953 Stueckelberg, Petermann: Renormierungsgruppe

1956 Wightman: Axiome der Quantenfeldtheorie (QFT)

1958 Thirring: lösbares Modell einer 2-dimensionalen QFT

1970 Glimm, Jaffe: Konstruktion des ϕ_2^4-Modells

Beiträge zur Verbindung von Statistischer Physik und QFT

1959 Schwinger: Euklidische Quantenfeldtheorie

1964 Symanzik: Euklidisches Funktionalintegral als Feynman-Kac-Formel

1973 Osterwalder, Schrader: Axiome der Euklidischen Quantenfeldtheorie

1974 Glimm, Jaffe, Simon: Konstruktion von Modellen der Quantenfeldtheorie ($P(\phi)_2$, ϕ^4_3)

1981 Aizenman, Fröhlich: Trivialität von $\phi^4_{4+\epsilon}$

1991 Rivasseau: Konstruktive Renormierung

0.2 Plan der Vorlesung

Wir beginnen mit grundlegenden Begriffen und Methoden der Quantenmechanik in der ursprünglichen Formulierung durch Dirac und von Neumann (1930-32). Zentral sind kanonische Vertauschungs- und Antivertauschungsrelationen und der Fock-Raum. Wir berechnen die Spektren des harmonischen Oszillator und des Wasserstoffatoms. Wir behandeln die Grundgleichungen des freien Bose-Feldes (Klein-Gordon-Gleichung) und des freien Fermi-Feldes (Dirac-Gleichung); aus letzterer folgt die Existenz des Spins.

Abweichungen zwischen berechneten und gemessenen Spektren der Atome führten zur Entwicklung der Quantenelektrodynamik 1948/49 als Prototyp einer Quantenfeldtheorie. Diese und ihre Verallgemeinerung auf nichtabelsche Eichtheorien werden wir nicht behandeln. Wir springen direkt zur axiomatischen Charakterisierung einer Quantenfeldtheorie nach Wightman. Diese Axiome betreffen Feldoperatoren $\Phi(t,\vec{x})$ und Vakuum Ω und verbinden die mathematische Formulierung der Quantenmechanik mit Erfahrungen aus der Quantenelektrodynamik (die aber die Axiome nicht erfüllt!) und grundlegenden physikalischen Prinzipien. Zum Zeitpunkt ihrer Entstehung (1956) war unklar, ob es, abgesehen von freien Bose- und Fermi-Feldern, Beispiele für Quantenfeldtheorien gibt, die die Wightman-Axiome realisieren. Solche Beispiele wurden anschließend gefunden (z.B. Thirring-Modell 1958, Schwinger-Modell 1962, $P(\phi)_2$ 1974, minimale Modelle der Konformen Feldtheorie 1984, Gross-Neveu-Modell 1985), allerdings ausschließlich in Dimension ≤ 3.

Direkte Beweise der Axiome sind äußerst schwierig. Deshalb wurden Varianten der Axiome entwickelt, die andere Aspekte betonen:

- *Lokale Quantenfeldtheorie.* Hier geht es um Algebren von Operatoren mit lokalisiertem Träger. Die Axiomatisierung geht auf Haag-Kastler (1964) zurück. Im Gegensatz zur Wightman-Theorie kommt man mit stetigen Operatoren aus und kann umfangreiche mathematische Methoden aus der Theorie der Operatoralgebren (C^*-Algebren und von-Neumann-Algebren) einsetzen. Es ist die einzige Variante von Quantenfeldtheorien, die sich auf gekrümmte (Lorentz-)Mannigfaltigkeiten verallgemeinern läßt. Wir werden die lokale QFT in der Vorlesung nicht behandeln.

- *Euklidische Quantenfeldtheorie.* Ausgangspunkt sind die Wightman-Funktionen, d.h. Vakuum-Erwartungswerte der Feldoperatoren. Diese

Wightman-Funktionen können analytisch auf komplex-wertige Zeiten $t + \mathrm{i}\tau$ fortgesetzt werden. Werte an rein imaginären Zeiten $\mathrm{i}\tau$ definieren dien Schwinger-Funktionen mit Eigenschaften, die aus den Wightman-Axiomen folgen. Osterwalder-Schrader konnten 1973-75 zeigen, daß diese Eigenschaften (bis auf wesentliche Regularitätseinschränkungen) sogar hinreichend zur Rekonstruktion der Wightman-Funktionen sind. Andererseits kann man sich Kandidaten für Schwinger-Funktionen als Momente (bzw. Kumulanten) eines Wahrscheinlichkeitsmaßes verschaffen. Formal ist ein solches Maß eine Verallgemeinerung von Maßen, die in Modellen der Statistischen Physik auftreten. In der Vorlesung sollen Aspekte dieses Programms skizziert werden.

Motiviert durch die Osterwalder-Schrader-Korrespondenz befassen wir uns mit Grundlagen der Statistischen Physik und einfachen Modellen. Ausgangspunkt ist immer die Zustandssumme, aus der thermodynamische Funktionen wie Energie, freie Energie und Entropie gewonnen werden. Wir betrachten einfache Spinmodelle. Darunter versteht man ein Gitter in D Dimensionen und die zufällige Zuordnung einer diskreten Variable (Spin) zu jedem Gitterpunkt. Jeder solchen zufälligen Konfiguration X wird eine bestimmte Energie $E(X)$ zugeordnet. Die Zustandssumme ist dann definiert als $Z = \sum_X \exp(-\beta E(X))$ mit $\beta := \frac{1}{kT}$, wobei T die Temperatur und k die Boltzmann-Konstante ist.

Die Zustandssumme kann so nicht berechnet werden. Es zeigt sich jedoch, daß sich das Problem stark vereinfacht im Limes unendlich großer Gitter. Sei N die Zahl der Gitterpunkte. Die Zustandssumme selbst divergiert im Limes $N \to \infty$, jedoch sollte $\lim_{N\to\infty} \frac{1}{N} \ln Z$ existieren, d.h. die Dichte der freien Energie. In vielen Fällen läßt sich eine Transfer-Matrix einführen. Die freie Energiedichte ist dann durch den größten Eigenwert der Transfer-Matrix gegeben, und dieser Eigenwert kann in einfachen Beispielen berechnet werden.

Zu diesen Beispielen gehören das eindimensionale Ising-Modell, das XXZ-Modell und das zweidimensionale Ising-Modell, die in der Vorlesung behandelt werden sollen. Deutlich anspruchsvoller sind das 6-Vertex-Modell und das 6-Vertex-Modell. Hier führen kommutierende Transfer-Matrizen zur Lösung. Die Kommutativität ist äquivalent zu einer Yang-Baxter-Relation, aus der die Quantengruppen hervorgegangen sind.

Typischerweise hängt die Energie $E(X)$ der Zufallskonfiguration X von Parametern K ab, die als Funktionen von Materialkonstanten und der Temperatur aufgefaßt werden können. Per Konstruktion ist Z für endliche Gitter eine stetig differenzierbare Funktion der K. Für den Limes $N \to \infty$ muß das nicht mehr gelten. Diese kritischen Punkte im Parameterraum, an denen höhere Ableitungen von Z divergieren, sind von größtem Interesse. Man spricht von Phasenübergängen, die tatsächlich in vielen Experimenten (z.B. Gefrieren/Tauen und Verdampfen/Kondensieren von Wasser) beobachtet werden. Modelle und Experimente zeigen kritisches Verhalten: In der Nähe des kritischen Punktes T_c wird eine Funktion $f(T)$ der Temperatur beschrieben durch $f(T)-f(T_c) = C|T-T_c|^\alpha$. Dabei sind C, T_c abhängig von den Materialkonstanten, während die kritischen Exponenten α (verschieden für $T > T_c$, $T < T_c$ und spezifisch für Funktion f) weitgehend universell sind. Wir werden die kritischen Exponenten für einfache Modelle berechnen.

Ein Verständnis der kritischen Exponenten wird durch die Renormierungsgruppe erzielt, die den Einfluß von Skalentransformationen auf die Modelle beschreibt. Die Renormierungsgruppe hat verschiedene Aspekte und spielt auch eine zentrale Rolle in Modellen der Quantenfeldtheorie (wo sie ursprünglich entdeckt wurde). Wir beschränken uns zunächst auf Spin-Modelle. Eine Möglichkeit der Skalentransformation besteht darin, nur den jeweils n-ten Gitterpunkt in jede Richtung zu nehmen und als Spinkonfiguration eine geeignete Mittelung $\bar{X}$. Bei geeigneter Transformation $E(X) \mapsto \bar{E}(\bar{X})$ der Energie (idealerweise eine einfache Transformation $K \mapsto \bar{K}$ der Parameter) kann Gleichheit der Zustandssummen $Z = \sum_X \exp(-\beta E(X)) = \sum_{\bar{X}} \exp(-\beta \bar{E}(\bar{X}))$ erreicht werden: Das ursprüngliche Modell kann deshalb auf größerer Längenskala durch ein effektives Modell beschrieben werden. Wir werden sehen, daß Fixpunkte dieses Renormierungsgruppenflusses den Phasenübergang lokalisieren und daß Linearisierungen und zugehörige Eigenwertprobleme erklären, weshalb Systeme aus 10^{23} Freiheitsgraden sehr genau durch wenige makroskopische Parameter zu beschreiben sind.

Diese Vereinfachung wird noch drastischer in der Nähe des kritischen Punktes, wo die makroskopischen Funktionen linearisiert werden können. Das Potenzverhalten wird reproduziert, aber zusätzlich werden Ungleichungen zwischen den kritischen Exponenten erhalten, die in vielen Fällen sogar Gleichungen werden. Oft genügen schon zwei kritische Exponenten, um alle anderen auszurechnen. Es zeigt sich, daß verschiedenste Phänomene in gleichen Universalitätsklassen (d.h. gleiche kritischen Exponenten) fallen.

Abschließend betrachten wir Modelle der Quantenfeldtheorie. Wir starten mit kontinuierlichen Variablen auf dem Gitter: Heisenberg-Modell und Gitter-ϕ^4-Modell. Solche Modelle stellen die Verbindung zur Quantenfeldtheorie her. Genauer gesagt handelt es sich dabei um die rigorose Konstruktion der Quantenfeldtheorien über die Gitter-Regularisierung. Wir diskutieren die Osterwalder-Schrader-Axiome und versuchen, die Trivialität des ϕ^4-Modells in $4+\epsilon$ Dimensionen nachzuvollziehen. Falls Zeit bleibt, behandeln wir echte Kontinuumstheorien wie das Thirring-Modell und das Luttinger-Schwinger-Modell.

Teil I
Grundlagen der Quantenfeldtheorie

1 Quantenmechanik

Die Quantenmechanik beschreibt die Physik der Atome, in der die Näherung der klassischen Physik versagt, aber die Energien noch so klein sind, daß Effekte der Quantenfeldtheorie vernachlässigt werden können. Die Quantenmechanik wird mathematisch in der Sprache der (komplexen, separablen) Hilbert-Räume und der linearen Operatoren beschrieben. Genauer gesagt wurde dieser Teil der Mathematik durch von Neumann erst für die Quantenmechanik in vollem Umfang geschaffen. Grundkenntnisse dazu werden als bekannt vorausgesetzt. Das Skalarprodukt ist linear im rechten Argument.

Im wesentlichen beruht die Quantenmechanik auf folgenden Postulaten:

Definition 1.1

(QM1) Die reinen Zustände eines quantenmechanischen Systems sind Strahlen (d.h. Einheitsvektoren mit beliebiger globaler Phase) im Hilbert-Raum $\mathcal{H}$.

(QM2) Quantenmechanische Observablen (d.h. beobachtbare Größen) sind selbstadjungierte lineare Operatoren auf $\mathcal{H}$. Der Erwartungswert einer Observablen A im reinen Zustand $\psi \in \mathcal{H}$, mit $\langle\psi,\psi\rangle = 1$, ist $E_\psi(A) := \langle\psi, A\psi\rangle$.

(QM3) Die Zeitentwicklung wird durch eine stark-stetige Einparametergruppe unitärer Operatoren $U(t)$ im Hilbert-Raum beschrieben (d.h. $U(t)$ unitär für jedes $t \in \mathbb{R}$, es gilt $U(t_1)U(t_2) = U(t_1+t_2)$ und $U(t)$ konvergiert für $t \to t_0$ in der starken Operatortopologie gegen $U(t_0)$).

(QM4) Teilchen gleicher Masse und gleichen Spins sind ununterscheidbar. Ein Zustandsvektor ist symmetrisch unter Permutation identischer Bosonen und antisymmetrisch unter Permutation identischer Fermionen.

Diese Axiome bedürfen einiger Erläuterungen.

Axiom (QM1) liefert die Wahrscheinlichkeitsinterpretation der Quantenmechanik. Sind ψ_1, ψ_2 zwei Strahlen in $\mathcal{H}$, insbesondere $\|\psi_i\| = \sqrt{\langle\psi_1,\psi_i\rangle} = 1$, dann gilt nach Cauchy-Schwarz $0 \leq |\langle\psi_2,\psi_1\rangle|^2 \leq 1$, und man postuliert $|\langle\psi_2,\psi_1\rangle|^2$ als Übergangswahrscheinlichkeit des Systems vom Zustand ψ_1 in den Zustand ψ_2 (symmetrisch in $1,2$). Sind $\psi_1, \psi_2 \in \mathcal{H}$ (verschiedene) Zustände, dann ist für jedes $c_1, c_2 \in \mathbb{C}^\times$ die Linearkombination (=Superposition) $\frac{c_1\psi_1+c_2\psi_2}{\|c_1\psi_1+c_2\psi_2\|}$ wieder ein Zustand.

Axiom (QM2) läßt sich auf gemischte Zustände, d.h. konvexe Linearkombinationen $\psi := \sum_i \alpha_i\psi_i$ mit $\langle\psi_i,\psi_j\rangle = \delta_{ij}$, $\alpha_i \geq 0$ und $\sum_i \alpha_i = 1$, verallgemeinern durch $E_\psi(A) = \sum_i \alpha_i E_{\psi_i}(A)$. Im Axiom (QM2) fordern wir nicht unbedingt, daß die linearen Operatoren beschränkt (und damit stetig) sind. Zwar kann man die

Quantenmechanik weitgehend mit linearen beschränkten Operatoren (und der von ihnen erzeugten Operatoralgebra; sogar der Hilbert-Raum ist dann verzichtbar) formulieren, sie wird dadurch aber nicht einfacher. Der Preis für die Arbeit mit selbstadjungierten unbeschränkten Operatoren ist die Notwendigkeit größter Vorsicht vor allem hinsichtlich der Definitionsbereiche:

Einen unbeschränkten linearen Operator T können wir bestenfalls als lineare stetige Abbildung $T : \mathrm{dom}(T) \to \mathcal{H}$ auffassen, wobei der Definitionsbereich $\mathrm{dom}(T) \subseteq \mathcal{H}$ ein linearer Teilraum von $\mathcal{H}$ ist. Die Definition selbstadjungierter beschränkter Operatoren als $\langle\psi_1, A\psi_2\rangle = \langle A\psi_1, \psi_2\rangle$ für alle $\psi_1, \psi_2 \in \mathcal{H}$ ist damit hinfällig. Wir müssen fordern, daß $\mathrm{dom}(T)$ *dicht* in $\mathcal{H}$ ist. Dann läßt sich der adjungierte Operator T^* wie folgt erklären: Wir definieren $\mathrm{dom}(T^*)$ als Menge aller $\xi \in \mathcal{H}$, so daß $\mathrm{dom}(T) \ni \psi \mapsto \langle\xi, T\psi\rangle \in \mathbb{C}$ stetig ist, d.h. es gibt ein $C \geq 0$ mit $|\langle\xi, T\psi\rangle| \leq C\|psi\|$ für alle $\psi \in \mathrm{dom}(T)$. Wegen der dichten Definiertheit setzt sich diese Abbildung für festes $\xi \in \mathrm{dom}(T^*)$ zu einer linearen stetigen Abbildung auf ganz $\mathcal{H}$ fort. Nach dem *Rieszschen Darstellungssatz* gibt es zu $\xi \in \mathrm{dom}(T^*)$ einen eindeutig bestimmten Vektor $\eta \in \mathcal{H}$ mit $\langle\eta, \psi\rangle = \langle\xi, A\psi\rangle$. Man zeigt, daß die Zuordnung $\xi \mapsto \eta := A^*\xi$ linear ist.

Definition 1.2 Sei T ein dicht definierter linearer Operator.

i) T heißt *symmetrisch*, falls $\langle\psi_1, T\psi_2\rangle = \langle T\psi_1, \psi_2\rangle$ für alle $\psi_1, \psi_2 \in \mathrm{dom}(T)$.

ii) T heißt *selbstadjungiert*, falls T symmetrisch ist und $\mathrm{dom}(T) = \mathrm{dom}(T^*)$ (kurz $T = T^*$) ist.

iii) T heißt *wesentlich selbstadjungiert*, falls der Abschluß $\overline{T}$ selbstadjungiert ist.

Einige Bemerkungen: Aus i) folgt $T\psi = T^*\psi$ für alle $\psi \in \mathrm{dom}(T)$. Der Definitionsbereich von T^* kann jedoch *größer* sein, im einfachsten Fall z.B. der Abschluß von T. Dieser ist wie folgt erklärt:

Definition 1.3 Die Teilmenge

$$\Gamma(T) := \{(\psi, T\psi) \in \mathcal{H} \times \mathcal{H} \ : \ \psi \in \mathrm{dom}(T)\}$$

heißt der *Graph* von T, und T heißt *abgeschlossen*, falls Γ abgeschlossen in $\mathcal{H} \times \mathcal{H}$ ist.

Stetige lineare Operatoren sind (nach Satz vom abgeschlossenen Graphen) immer abgeschlossen. Es gilt:

Lemma 1.4 (z.B. Reed-Simon, Bd. I, Thm VIII.1) *Sei T dicht definierter linearer Operator. Dann gilt:*

i) *T^* ist abgeschlossen.*

ii) *T ist genau dann abschließbar, wenn* $\mathrm{dom}(T^*)$ *dicht ist, und in diesem Fall gilt $\bar{T} = T^{**}$ und $\bar{T}^* = T^*$.*

Insbesondere sind dicht definierte symmetrische Operatoren T immer abschließbar und haben den Abschluß $\bar{T} = T^{**}$. Selbstadjungierte Operatoren sind abgeschlossen, es ist jedoch fast immer schwierig, den Definitionsbereich zu charakterisieren. Oft gelingt es aber zu zeigen, daß ein Operator wesentlich selbstadjungiert ist, und im Prinzip genügt das, da der Abschluß eindeutig ist. Für Vertiefung, Beispiele und Gegenbeispiele sei auf Band I+II von Reed-Simon verwiesen.

Abgeschlossene Operatoren T besitzen eine Spektraltheorie:

Definition 1.5 Eine Zahl $\lambda \in \mathbb{C}$ gehört zur Resolventenmenge $\varrho(T)$ eines abgeschlossenen Operators T, falls $\lambda \,\mathrm{id} - T : \mathrm{dom}(T) \to \mathcal{H}$ bijektiv ist. In diesem Fall heißt der lineare stetige Operator $R_\lambda(T) := (\lambda \,\mathrm{id} - T)^{-1} : \mathcal{H} \to \mathcal{H}$ die *Resolvente* von T in λ. Das Komplement $\mathbb{C} \setminus \varrho(T)$ heißt das *Spektrum* $\sigma(T)$ von T.

Für $\lambda \in \sigma(T)$ ist $\lambda \,\mathrm{id} - T$ nicht injektiv (in diesem Fall ist $\ker(\lambda \,\mathrm{id} - T) \neq \{0\}$, und λ ist *Eigenwert*) oder nicht surjektiv. Es gilt:

Theorem 1.6 *Ein symmetrischer Operator T ist genau dann selbstadjungiert, wenn $\sigma(T) \subseteq \mathbb{R}$.*

Wir erinnern daran, daß jeder *endlich-dimensionale* Hilbert-Raum eine Orthonormalbasis aus Eigenvektoren ψ_i eines selbstadjungierten Operators besitzt. Ist $\psi = \sum_i c_i \psi_i$ mit $\langle \psi, \psi \rangle = \sum_i |c_i|^2 = 1$ und $A = A^*$ mit $A\psi_i = \lambda_i \psi_i$, so folgt $A\psi = \sum_i c_i \lambda_i \psi_i$ und (wegen der Orthonormalität der ψ_i)

$$E_\psi(A) = \langle \psi, A\psi \rangle = \sum_i \lambda_i |c_i|^2 \,.$$

Somit lassen sich für endlich-dimensionale Hilbert-Räume die Erwartungswerte aus der Spektraltheorie bestimmen. Dieses *Spektraltheorem* verallgemeinert sich auf selbstadjungierte Operatoren in unendlich-dimensionalen separablen Hilbert-Räumen. Abgeschlossene symmetrische Operatoren reichen dazu nicht!

Theorem 1.7 (z.B. Reed-Simon, Bd I, Prop VIII.1 und Thm VIII.4) *Ein linearer Operator T auf einem separablen Hilbert-Raum $\mathcal{H}$ ist genau dann selbstadjungiert, wenn es einen Maßraum (X, μ), einen unitären Operator $U : \mathcal{H} \to L^2(X, \mu)$ und eine reellwertige Funktion f auf X gibt mit*

i) $\psi \in \mathrm{dom}(T) \quad \Leftrightarrow \quad f \cdot (U\psi) \in L^2(X, \mu)$

ii) *Für jedes $\varphi \in U\mathrm{dom}(T)$ gilt $(UTU^{-1}\varphi)(x) = f(x)\varphi(x)$.*

Das Spektrum von T ist der wesentliche Wertebereich von f, d.h.

$$\sigma(T) = \text{ess-im}(f) = \{\lambda \in \mathbb{C} \;:\; \textit{für alle } \epsilon > 0 \textit{ gilt } \mu(\{x \;:\; |f(x) - \lambda| < \epsilon\}) > 0\} \,.$$

Auf diese Weise können wir Borel-Funktionen $h(T)$ selbstadjungierter Operatoren bilden: Sei h eine Borel-Funktion auf $\mathbb{R}$ und f die zu T gehörige Funktion aus obigem Theorem, und bezeichne M_g die punktweise Multiplikation

$(M_g\varphi)(x) = g(x)\varphi(x)$. Dann definiert $h(T) := U^{-1}M_{h(f)}U$ einen linearen dicht definierten Operator auf H. Von besonderer Bedeutung sind die so konstruierten Operatoren $e^{\mathrm{i}T}$, aus der sich unitäre Operatoren bilden lassen, und $\chi_\Omega(T)$ für die charakteristische Funktion χ_Ω der Borel-Menge $\Omega \subseteq \mathbb{R}$, aus der sich Projektoren bilden lassen. Funktionen wie z.B. $\arctan(T)$ sind beschränkt und enthalten die gesamte Information über T. Aus diesem Grund können unbeschränkte Operatoren letztendlich vermieden werden.

Beispiel 1.8 Wir betrachten auf $\mathcal{H} = L^2(\mathbb{R})$, versehen mit dem Lebesgue-Maß, die beiden unbeschränkten Operatoren

$$(Q\psi)(x) = x\psi(x) \;, \qquad (P\psi)(x) = -\mathrm{i}\psi'(x) \;.$$

Der Definitionsbereich beider Operatoren umfaßt den Schwartz-Raum $\mathcal{S}(\mathbb{R})$ der schnell fallenden glatten Funktionen. Nach maximaler Erweiterung des Definitionsbereichs sind Q, P selbstadjungiert, und zwar Q direkt mit $U = \mathrm{id}$ nach Thm. 1.7 und P unter Verwendung der Fourier-Transformation $(U\psi)(p) := \hat{\psi}(p) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}\int_{\mathbb{R}} dx\; \psi(x)e^{-\mathrm{i}px}$. Nach Plancherel-Theorem liefert diese einen unitären Operator von $L^2(\mathbb{R})$ nach $L^2(\mathbb{R})$ mit Inversem $(U^{-1}\hat{\psi})(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}\int_{\mathbb{R}} dp\; \hat{\psi}(p)e^{\mathrm{i}px}$, und es gilt $((UPU^{-1})\hat{\psi})(p) = p\hat{\psi}(p)$.

Im allgemeinen muß für zwei selbstadjungierte Operatoren das Produkt nicht definiert sein. In diesem Fall gilt jedoch $Q\mathcal{S}(\mathbb{R}) = P\mathcal{S}(\mathbb{R}) = \mathcal{S}(\mathbb{R})$ und deshalb

$$QP - PQ =: [Q, P] = \mathrm{i} \tag{1.1}$$

zunächst auf dem dichten Teilraum $\mathcal{S}(\mathbb{R})$, nach Fortsetzung dann auf ganz $\mathcal{H} = L^2(\mathbb{R})$.

Es sei bemerkt, daß P auf anderen Hilbert-Räumen wie $L^2([0,1])$ oder $L^2(\mathbb{R}_+)$ gänzliche andere Eigenschaften hat, da die Inversion der Fourier-Transformation Randbeiträge liefert. Es läßt sich zeigen, daß es auf $L^2([0,1])$ eine kontinuierliche Familie von selbstadjungierten Erweiterungen von P gibt mit Definitionsbereich gegeben durch quasi-periodische Funktionen mit $f(0) = e^{\mathrm{i}\vartheta}f(1)$. Dagegen gibt es auf $L^2(\mathbb{R}_+)$ keine selbstadjungierte Erweiterung von P. $\triangleleft$

Die skizzierten Eigenschaften selbstadjungierter Operatoren sind auch die Grundlage für das Postulat (QM3). Aus den Bemerkungen nach Thm. 1.7 folgt, daß für einen selbstadjungierten linearen Operator H durch $t \mapsto U_H(t) := e^{-\mathrm{i}tH}$ eine Abbildung von $\mathbb{R}$ in die unitären Operatoren auf $\mathcal{H}$ erklärt wird. Diese hat folgende Eigenschaften:

Theorem 1.9 (z.B. Reed-Simon, Bd. I, Thm VIII.7) *Sei H selbstadjungiert und $U_H(t) := e^{-\mathrm{i}tH}$. Dann gilt*

i) $U_H(s+t) = U_H(s)U_H(t)$ *(d.h. U_H ist Einparametergruppe unitärer Operatoren)*

ii) *Konvergiert t gegen t_0, so konvergiert $U_H(t)\psi$ gegen $U_H(t_0)\psi$ für jedes $\psi \in \mathcal{H}$ (d.h. U_H ist stark-stetig)*

iii) *Falls $\lim_{t\to 0} \frac{1}{t}(U_H(t)\psi - \psi) =: \eta$ für ein ψ existiert, dann $\psi \in \mathrm{dom}(H)$ und $\eta = -\mathrm{i}H\psi$.*

Nach einem fundamentalen Theorem von Stone gilt die Umkehrung:

Theorem 1.10 (z.B. Reed-Simon, Bd. I, Thm VIII.8) *Sei $t \mapsto U(t)$ eine stark-stetige Einparametergruppe unitärer Operatoren. Dann gibt es einen selbstadjungierten Operator H auf $\mathcal{H}$ mit $U(t) = e^{-\mathrm{i}Ht}$.*

Somit liefert Postulat (QM3) die Existenz eines ausgezeichneten selbstadjungierten Operators H, des *Hamilton-Operators*, welcher Translationen in der Zeit generiert. Es gibt zwei (extremale) Betrachtungsweisen: Im *Schrödinger-Bild* werden die Operatoren als zeitlich konstant angesehen, und allein die Zustände tragen die Zeitentwicklung: $\psi(t) = U(t)\psi_0$. Es folgt die Schrödinger-Gleichung

$$\mathrm{i}\frac{d}{dt}\psi(t) = H\psi(t) \ . \tag{1.2}$$

Typischerweise wählt man auf $\mathcal{H} = L^2(\mathbb{R})$ den Hamilton-Operator $H = \frac{1}{2}P^2 + V(Q)$ mit den beiden Operatoren P, Q aus Beispiel 1.8 und einer beliebigen Borel-Funktion V (Potential), gegebenenfalls verallgemeinert in D Dimensionen. Dann kann die Schrödinger-Gleichung $\mathrm{i}\frac{d}{dt}\psi(t,x) = H\psi(t,x)$ für $\psi(t,.) \in L^2(\mathbb{R})$ als partielle Differentialgleichung aufgefaßt und mit entsprechenden Lösungsmethoden behandelt werden.

Alternativ nimmt man im *Heisenberg-Bild* die Zustände als zeitlich konstant an, während die Operatoren die Zeitentwicklung tragen, $A(t) = U(t)^{-1}A_0U(t)$. Anwenden auf Vektoren und Differentiation liefert

$$\frac{d}{dt}A(t) = \mathrm{i}[H, A(t)] := \mathrm{i}(HA(t) - A(t)H) \ .$$

Die Erwartungswerte sind in beiden Bildern die gleichen: $E_{\psi(t)}(A) = E_\psi(A(t)) = \langle \psi_0, U^{-1}(t)A_0U(t)\psi_0\rangle$. Auch die Übergangswahrscheinlichkeiten sind die gleichen und bleiben zeitlich konstant: $\langle \psi(t), \phi(t)\rangle = \langle \psi_0, \phi_0\rangle$. Eine Verallgemeinerung ist folgendes Theorem von Wigner:

Theorem 1.11 (Wigner 1931) *Jede Symmetrie des Zustandsraums, d.h. eine Bijektion S von $\mathcal{H}$ auf sich selbst, die die Wahrscheinlichkeiten erhält $|\langle \psi^S, \phi^S\rangle| = |\langle \psi, \phi\rangle|$ für alle Strahlen ϕ, ψ in $\mathcal{H}$, läßt sich entweder durch einen unitären oder durch einen anti-unitären Operator implementieren.*

Das verbleibende Postulat (QM4) wird relevant in Systemen mit Teilcheninterpretation, also solchen, die der Quantenfeldtheorie nahekommen. Teilchen sind unitäre irreduzible Darstellungen der Poincaré-Gruppe $\mathbb{R}^{1,3} \rtimes SO(1,3)$ mit positiver Energie. Nach einem weiteren Theorem von Wigner werden solche Darstellungen klassifiziert durch Masse und Spin. In der Quantenfeldtheorie ist (QM4) jedoch kein eigenes Postulat, sondern kann in $D \geq 3$ Dimensionen aus den anderen Axiomen bewiesen werden.

2 Der harmonische Oszillator

Wir betrachten den Operator $H = \frac{1}{2}(P^2 + Q^2)$ auf dem Hilbert-Raum $\mathcal{H} = L^2(\mathbb{R})$ mit Lebesgue-Maß für P, Q definiert in Beispiel 1.8. Zwar sind P^2 und Q^2 wieder selbstadjungiert nach Funktionalkalkül, für die Summe muß das aber nicht gelten. Ziel ist die Bestimmung des Spektrums von H und der Beweis der Selbstadjungiertheit.

Dazu betrachten wir

$$a = \frac{1}{\sqrt{2}}\big(Q + \mathrm{i}P\big) , \qquad a^* = \frac{1}{\sqrt{2}}\big(Q - \mathrm{i}P\big) \tag{2.1}$$

mit Definitionsbereich $\mathrm{dom}(a) = \mathrm{dom}(a) := \mathrm{dom}(P) \cap \mathrm{dom}(Q)$. Bezeichne $\mathcal{F}$ die Fourier-Transformation, so gilt für $\psi \in \mathrm{dom}(a)$ und $\xi \in \mathrm{dom}(a^*)$

$$\langle \xi, a\psi \rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \langle \xi, (x + \mathrm{i}\mathcal{F}^{-1}p\mathcal{F})\psi \rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \langle (x - \mathrm{i}\mathcal{F}^{-1}p\mathcal{F})\xi, \psi \rangle = \langle a^*\xi, \psi \rangle$$

wegen Unitarität der Fourier-Transformation, d.h. a und a^* sind zueinander adjungiert, wegen $(a^*)^* = a$ jeweils abgeschlossen. Zumindest auf $\mathrm{dom}(P^2) \cap \mathrm{dom}(Q^2)$ zeigt elementares Nachrechnen, daß

$$[a, a^*] = \mathrm{id}_{\mathcal{H}} , \qquad H = N + \frac{1}{2}\mathrm{id}_{\mathcal{H}} \quad \text{für } N := a^*a . \tag{2.2}$$

Auch hier ist zu betonen, daß wir noch nichts über Selbstadjungiertheit von N sagen können. Da $\mathrm{dom}(N)$ jedoch $\mathrm{dom}(a)$ enthält, gilt zumindest

$$\langle \eta, N\eta \rangle = \langle a\eta, a\eta \rangle = \langle N\eta, \eta \rangle \geq 0 \quad \text{für alle } \eta \in \mathrm{dom}(N) , \tag{2.3}$$

d.h. N ist *symmetrisch* und *positiv*. Diese Positivitätseigenschaft sowie die zumindest auf $\mathrm{dom}(P^3) \cap \mathrm{dom}(Q^3)$ gültigen Vertauschungsrelationen

$$[N, a] = -a , \quad [N, a^*] = a^*$$

erlauben folgende Aussage:

Satz 2.1 *Angenommen, es gibt ein $\psi \in \mathcal{S}(\mathbb{R})$ mit $H\psi = \lambda\psi$. Dann gilt:*

i) *Es gibt ein $\psi_0 \in \mathcal{H}$ mit $H\psi_0 = \frac{1}{2}\psi$.*

ii) *Die Vektoren* $\psi_n := \frac{1}{\sqrt{n!}}(a^*)^n\psi_0$ *bilden ein ONS in* $\mathcal{H}$*, und es gilt* $H\psi_n = (n+\frac{1}{2})\psi_n$.

Beweis. Sei $\lambda = \mu + \frac{1}{2}$. Aus $Na = aN - a$ und $Na^* = a^*N + a^*$ gültig auf $\mathcal{S}(\mathbb{R})$ folgt

$$Na^n\psi = (\mu - n)a^n\psi\ , \qquad N(a^*)^n\psi = (\mu+n)(a^*)^n\psi\ .$$

Da $a^n\psi \in \mathrm{dom}(N)$ für alle n, folgt

$$\langle a^n\psi, Na^n\psi\rangle = (\mu-n)\langle a^n\psi, a^n\psi\rangle\ .$$

Das ist nur dann mit der Positivität (2.3) verträglich, wenn es ein $n_0 \in \mathbb{N}$ gibt mit $a^{n_0}\psi \neq 0$ aber $a^{n_0+1}\psi = 0$. Normierung $\psi_0 := \frac{a^{n_0}\psi}{\|a^{n_0}\psi\|}$ liefert dann $a\psi_0 = 0$ und $N\psi_n = n\psi_n$. Die Orthonormalität der ψ_n folgt aus der Derivationseigenschaft des Kommutators $[a,(a^*)^n] = n(a^*)^{n-1}$ und elementarer Rechnung. □

Der Beweis, daß H überhaupt Eigenwerte hat, ist nun schnell nachzuholen. Die Gleichung $a\psi_0 = 0$ lautet für Schwartz-Funktionen einfach

$$a\psi_0 = \frac{1}{\sqrt{2}}(x\psi_0(x) + \psi_0'(x)) = 0 \qquad \Rightarrow \qquad \psi_0(x) = \frac{1}{\sqrt[4]{\pi}}e^{-\frac{1}{2}x^2} \in \mathcal{S}(\mathbb{R})\ . \tag{2.4}$$

Somit ist die Voraussetzung von Satz 2.1 erfüllt, und $\mathbb{N} + \frac{1}{2}$ ist die Gesamtheit aller Eigenwerte von H. Das Problem ist damit jedoch noch nicht gelöst, da wir auch die Spektralwerte kontrollieren müssen, die keine Eigenwerte sind.

Nachrechnen zeigt $\psi_n = P_n(x)e^{-\frac{1}{2}x^2}$, wobei $P_n(x) = \frac{1}{\sqrt[4]{\pi}}\sqrt{\frac{2^n}{n!}}x^n + \sum_{k=0}^{n-1} c_k x^k$ ein Polynom vom Grad n ist. Wir zeigen:

Lemma 2.2 *Sei* $f \in L^2(\mathbb{R})$ *mit* $\langle\psi_n, f\rangle = \int_{\mathbb{R}} dx\ \overline{\psi_n(x)}f(x) = 0$ *für alle* $n \in \mathbb{N}$*. Dann ist* $f(x) = 0$ *fast überall.*

Beweis. Nach Linearkombination gilt auch $\int_{\mathbb{R}} dx\ x^n e^{-\frac{1}{2}x^2}f(x) = 0$ für alle n. Für jedes $z \in \mathbb{C}$ sind $e^{\mathrm{i}xz-\frac{1}{2}x^2}$ und $xe^{\mathrm{i}xz-\frac{1}{2}x^2}$ quadratintegrierbar, so daß nach Cauchy-Schwarz die Funktion $F(z) := \int_{\mathbb{R}} dx\ e^{\mathrm{i}xz-\frac{1}{2}x^2}f(x)$ und ihre Ableitung $F'(z)$ (nach Satz von der dominierten Konvergenz) in jedem Punkt $z \in \mathbb{C}$ absolut konvergent sind. Somit ist F eine ganze Funktion (auf ganz $\mathbb{C}$ holomorph), insbesondere beliebig oft differenzierbar in 0 mit $F^{(n)}(z) = \mathrm{i}^n\int_{\mathbb{R}} dx\ x^n e^{-\frac{1}{2}x^2}f(x) = 0$. Nach dem Identitätssatz für holomorphe Funktionen ist $F(z) = 0$ für alle z, insbesondere alle $z = p \in \mathbb{R}$, d.h. $e^{-\frac{1}{2}x^2}f(x)$ hat verschwindende Fourier-Transformation. Da die Fourier-Transformation nach dem Plancherel-Theorem unitär ist, ist auch $e^{-\frac{1}{2}x^2}f(x) = 0$ fast überall, somit $f(x) = 0$ fast überall. □

Damit ist eines der Kriterien dafür gezeigt, daß $(\psi_n)_{n\in\mathbb{N}}$ eine ONB von $\mathcal{H} = L^2(\mathbb{R})$ ist, insbesondere ist $L^2(\mathbb{R})$ separabel. Folglich definiert die Abbildung $U(\psi) = (\langle\psi_n,\psi\rangle)_{n\in\mathbb{N}}$ einen unitären Operator $U : \mathcal{H} \to \ell^2(\mathbb{N})$. Wir *definieren* nun einen selbstadjungierten Operator H auf $\mathcal{H}$ über das Spektraltheorem 1.7:

Definition 2.3 Sei $\psi_0 = \frac{1}{\sqrt[4]{\pi}} e^{-\frac{1}{2}x^2}$, $\psi_n := \frac{1}{\sqrt{2^n n!}} \Big(x - \frac{d}{dx}\Big)^n \psi_0$ und $U : \mathcal{H} \to \ell^2(\mathbb{N})$ definiert durch $U(\psi) = (\langle \psi_n, \psi\rangle)_{n\in\mathbb{N}}$. Dann werde ein selbstadjungierter Operator H auf $\mathcal{H}$ erklärt durch

i) $\mathrm{dom}(H) := \{\sum_{n=0}^\infty c_n\psi_n \;:\; \sum_{n=0}^\infty (n+\frac{1}{2})^2 |c_n|^2 < \infty\}$

ii) $H\psi := U^{-1}M_f U\psi$ für $\psi \in \mathrm{dom}(H)$ und $f(n) = n + \frac{1}{2}$.

Nach Konstruktion stimmt H auf $\mathcal{S}(\mathbb{R})$ mit $a^*a + \frac{1}{2}$ überein, so daß wir von nun an beide identifizieren. Das Spektrum von H ist der wesentliche Wertebereich von f, also $\mathbb{N} + \frac{1}{2}$, so daß H keine weiteren Spektralwerte als die zuvor bestimmten Eigenwerte hat.

Für $\lambda \in \varrho(H)$ ist die Resolvente $R_\lambda(H) = (H - \lambda\,\mathrm{id}_{\mathcal{H}})^{-1}$ ein beschränkter Operator. Mehr noch: $R_\lambda(H)$ ist kompakt.

Definition 2.4 Ein linearer beschränkter Operator $T \in \mathcal{B}(\mathcal{H})$ heißt *kompakt*, wenn er eine der folgenden äquivalenten Eigenschaften hat:

i) Für jede beschränkte Folge $(v_n)_{n\in\mathbb{N}}$ besitzt $(Tv_n)_{n\in\mathbb{N}}$ eine konvergente Teilfolge.

ii) T bildet beschränkte Teilmengen von $\mathcal{H}$ in relativ kompakte Teilmengen ab.

iii) T bildet schwach-konvergente Folgen in $\mathcal{H}$ in norm-konvergente Folgen ab.

iv) Es gibt eine Folge $(F_n)_{n\in\mathbb{N}}$ von Operatoren mit endlichem Rang, die in der Operatornorm gegen T konvergiert.

v) Für jedes $\epsilon > 0$ gibt es einen endlich-dimensionalen Teilraum $\mathcal{X} \subseteq \mathcal{H}$, so daß $\sup\limits_{w\in\mathcal{X}^\perp,\, \|w\|\le 1} \|Tw\| < \epsilon$.

Die letzte Eigenschaft ist für $R_\lambda(H)$ wegen $R_\lambda(\psi_n) = \frac{1}{n-\lambda}\psi_n$ leicht zu zeigen. Wähle ein $N > |\lambda| + \frac{1}{\epsilon}$ und $\mathcal{X} = \mathrm{span}(\psi_0, \dots, \psi_{N-1})$. Dann hat ein Vektor $w \in \mathcal{X}^\perp$ mit $\|w\| \le 1$ eine Darstellung $w = \sum_{n=N} c_n\psi_n$ mit $\sum_{n=N} |c_n|^2 \le 1$, und es folgt

$$\|R_\lambda(H)w\|^2 = \sum_{n=N}^\infty \frac{1}{|n-\lambda|^2}|c_n|^2 \le \frac{1}{(N-|\lambda|)^2} < \epsilon^2 \,.$$

Die Kompaktheit von H^{-1} für den harmonischen Oszillator erlaubt Rückschlüsse für eine große Klasse komplizierter Quantensysteme. Wir erwähnen zunächst:

Satz 2.5 *Sei $\mathcal{H}$ unendlich-dimensionaler komplexer separabler Hilbert-Raum und $T \in \mathcal{B}(\mathcal{H})$ kompakt. Dann gilt:*

i) $0 \in \sigma(T)$

ii) $\sigma(T) \setminus \{0\}$ *ist entweder eine Nullfolge oder einer endliche Menge von Eigenwerten, und* $1 \le \dim\ker(T - \lambda\,\mathrm{id}_{\mathcal{H}}) < \infty$ *für alle* $\lambda \in \sigma(T) \setminus \{0\}$.

iii) *Ist T selbstadjungiert, dann besitzt $\mathcal{H}$ eine ONB $\{\phi_n\}$ aus Eigenvektoren von T, genauer $T\phi_n = \lambda_n \phi_n$ mit $\lambda_n \to 0$ für $n \to \infty$.*

Hat ein Quantensystem einen Hamilton-Operator H_1 mit $\epsilon \, \mathrm{id}_{\mathcal{H}} \leq H \leq cH_1$ für $\epsilon, c > 0$, so ist H_1 invertierbar und $A := HH_1^{-1}$ beschränkt. Dann ist $H_1^{-1} = H^{-1}A$ kompakt nach Definition 2.4.i), so daß auch H_1^{-1} und deshalb H_1 ein diskretes Spektrum aus Eigenwerten besitzt und $\mathcal{H}$ eine ONB aus Eigenvektoren von H_1 hat. Eine wichtige Beispielklasse ist der anharmonische Oszillator mit $H_1 = H + c_4 Q^4 + c_1 Q + c_0$ mit $c_4 > 0$. Obwohl eine explizite Lösung unmöglich ist, wissen wir nach obigen Überlegungen, daß $\sigma(H_1)$ nur aus Eigenwerten besteht und das Eigenwertproblem eine ONB liefert. Mit deutlich größerem Aufwand kann bewiesen werden (z.B. Reed-Simon, Bd IV, Thm XIII.16), daß $\frac{1}{2}P^2 + V(Q)$ mit V reell, beschränkt auf jeder kompakten Teilmenge von $\mathbb{R}$, aber mit $V(x) \to \infty$ für $|x| \to \infty$, stets ein reines Punktspektrum besitzt.

Wegen der Ununterscheidbarkeit von Teilchen ist der harmonische Oszillator ein fundamentaler Baustein für Modelle der Quantenmechanik und Quantenfeldtheorie. Sei $\mathcal{H} = \ell^2(J)$ Hilbert-Raum eines Einteilchen-Quantensystems mit ONB $\{\eta_j\}_{j\in J}$ gebildet aus reinen Zuständen. Dann ist ein Zustand im Vielteilchen-Quantensystem vollständig charakterisiert durch Angabe der Anzahl n_j der Teilchen im Zustand η_j. Die Dynamik läßt sich beschreiben als Änderung dieser n_j. Die elementaren Bausteine sind dann die Operationen der Erhöhung a_j^* und Verringerung a_j der Teilchenzahlen im Zustand η_j. Diese Operatoren erfüllen

$$[a_i, a_j] = 0 \;, \qquad [a_i^*, a_j^*] = 0 \;, \qquad [a_i, a_j^*] = \delta_{ij} \;. \tag{2.5}$$

Wir nutzen diese Operatoren zur Konstruktion des Hilbert-Raums $\mathcal{F}$ (= Fock-Raum) des Vielteilchen-Quantensystems. Dazu postuliert man einen ausgezeichneten Zustand $\Omega = \otimes_j \psi_0$ (das Vakuum) mit $a_j \Omega = 0$ für alle $j \in J$ und $\langle \Omega, \Omega \rangle = 1$. Dann erklärt man

$$\mathcal{F} = \overline{\mathrm{span}\{(n_j)_{j\in J}\}} \;, \qquad (n_j)_{j\in J} := \prod_{j\in J} \frac{1}{\sqrt{n_j!}} (a_j^*)^{n_j} \Omega \tag{2.6}$$

und vereinbart, daß a_j und a_j^* zueinander adjungiert bezüglich des Skalarprodukts sind. Die Kommutatorrelationen (2.5) sichern dann $\langle (n_j)_{j\in J}, (m_j)_{j\in J} \rangle = \prod_{j\in J} \delta_{n_j, m_j}$. Alternativ kann man den Operator $N = \sum_{j\in J} a_j^* a_j$ für die Gesamtteilchenzahl nehmen und die Teilräume $\mathcal{F}_n := \ker(N - n \mathrm{id}_{\mathcal{F}})$ betrachten. Dann wird $\mathcal{F}_0 = \mathbb{C}\Omega$ durch das Vakuum aufgespannt, und $\mathcal{F}_1 = \mathcal{H}$ ist der Einteilchen-Hilbert-Raum. Offenbar gilt $\mathcal{F} = \bigoplus_{n=0}^{\infty} \mathcal{F}_n$.

Die obige Konstruktion bezieht sich auf Systeme identischer Bosonen. Für Fermionen dürfen die Besetzungszahlen nur die Werte $n_j \in \{0, 1\}$ annehmen (Pauli-Prinzip). Das wird erzwungen, indem man statt (2.5) Antikommutator-

Relationen postuliert:

$$\begin{aligned}
\{b_i, b_j\} = 0\ , \qquad \{b_i^*, b_j^*\} = 0\ , \qquad \{b_i, b_j^*\} = \delta_{ij}\ , \\
b_j\Omega = 0 \ \ \forall j \in J\ , \quad \langle \Omega, \Omega\rangle = 1\ , \\
\mathcal{F} = \overline{\operatorname{span}\{(n_j)_{j\in J}\}}\ , \qquad (n_j)_{j\in J} := \prod_{j\in J} (b_j^*)^{n_j}\Omega\ .
\end{aligned} \tag{2.7}$$

Dabei bezeichnet $\{A, B\} := AB + BA$ den Antikommutator. Insbesondere ist $(b_j^*)^{n_j}\Omega = 0$ für $n_j \notin \{0, 1\}$.

Im gravierenden Unterschied zu den bosonischen a_j, a_j^* sind die fermionischen b_j, b_j^* beschränkte lineare Operatoren. Wir können sie durch $b_j \equiv b(\eta_j)$ und $b_j^* \equiv b^*(\eta_j)$ mit linearen beschränkten Operatoren $b, b^* \in \mathcal{B}(\mathcal{H})$ auf dem Einteilchen-Hilbert-Raum $\mathcal{H}$ identifizieren. In dieser Identifikation lauten die Antivertauschungsrelationen

$$b(\psi)b(\phi) + b(\phi)b(\psi) = 0\ , \quad b(\psi)b^*(\phi) + b^*(\phi)b(\psi) = \langle \psi, \phi\rangle\, \mathrm{id}_{\mathcal{H}} \tag{2.8}$$

(und für b^* durch Adjungieren). Die von allen $b(\psi), b^*(\psi)$ zusammen mit den Relationen (2.8) erzeugte C^*-Algebra heißt *CAR-Algebra*. Sie spielt eine wichtige Rolle in der Theorie der Operatoralgebren. Es gibt auch eine bosonische Variante, die CCR-Algebra. Da die a, a^* unbeschränkt sind, muß die CCR-Algebra anders konstruiert werden.

3 Der Drehimpuls

Wir betrachten nun auf $\mathcal{H} = L^2(\mathbb{R}^3)$ die dreidimensionale Verallgemeinerung $j \in \{1, 2, 3\}$

$$Q_j := \frac{1}{\sqrt{2}}(a_j^* + a_j)\ , \qquad P_j := \frac{\mathrm{i}}{\sqrt{2}}(a_j^* - a_j)\ , \qquad j \in \{1, 2, 3\} \tag{3.1}$$

von Beispiel 1.8. Wir definieren folgende *Drehimpuls-Operatoren*:

$$\begin{aligned}
&L_1 = Q_2P_3 - Q_3P_2\ , \quad L_2 = Q_3P_1 - Q_1P_3\ , \quad L_3 = Q_1P_2 - Q_2P_1\ , \\
&L^2 := L_1^2 + L_2^2 + L_3^2
\end{aligned} \tag{3.2}$$

(kurz $L_i = \sum_{j,k=1}^3 \epsilon_{ijk} Q_j P_k$, wobei ϵ_{ijk} der vollständig antisymmetrischen Tensor mit $\epsilon_{123} = 1$ ist). Als Definitionsbereich nehmen wir zunächst den Raum der endlichen Linearkombinationen von Eigenfunktionen des dreidimensionalen harmonischen Oszillators:

$$\mathcal{X} := \operatorname{span}(\psi_{n_1,n_2,n_3}\ :\ n_i \in \mathbb{N})\ , \qquad \psi_{n_1,n_2,n_3}(x_1, x_2, x_3) = \prod_{j=1}^3 \psi_{n_j}(x_j)\ .$$

Nach Lemma 2.2 ist $\mathcal{X}$ dicht, andererseits ist $\mathcal{X}$ invariant unter L_j, P_j, Q_j. Weiter sind die Operatoren L_j, L^2 *symmetrisch*. Nach einem fundamentalen Kriterium von von Neumann, das wir hier auch beweisen, sind dann die L_j, L^2 *wesentlich selbstadjungiert* auf $\mathcal{X}$. Der Übersichtlichkeit wegen schreiben wir $T - \lambda$ statt $T - \lambda \mathrm{id}_{\mathcal{H}}$.

Theorem 3.1 *Für einen symmetrischen dicht definierten Operator sind äquivalent:*

i) T *ist selbstadjungiert*

ii) T *ist abgeschlossen und* $\ker(T^* \pm \mathrm{i}) = \{0\}$

iii) $\mathrm{im}(T \pm \mathrm{i}) = \mathcal{H}$

Beweis. i)⇒ii) Abgeschlossenheit folgt aus Lemma 1.4. Angenommen, $T^*\psi = \mathrm{i}\psi$, dann

$$-\mathrm{i}\langle\psi,\psi\rangle = \langle \mathrm{i}\psi,\psi\rangle = \langle T^*\psi,\psi\rangle = \langle\psi,T\psi\rangle = \langle\psi,T^*\psi\rangle = \mathrm{i}\langle\psi,\psi\rangle$$

somit $\psi = 0$. Allgemein folgt $\ker(T^* - z) = \{0\}$ für jedes $z \in \mathbb{C} \setminus \mathbb{R}$.

ii)⇒iii) Angenommen, $T - \mathrm{i}$ wäre nicht dicht in $\mathcal{H}$. Dann gibt es ein $0 \neq \psi \in (\overline{\mathrm{im}(T-\mathrm{i})})^\perp = (\mathrm{im}(T-\mathrm{i}))^\perp$, so daß für alle $\phi \in \mathrm{dom}(T)$ gilt $0 = \langle\psi,(T-\mathrm{i})\phi\rangle$. Wegen der Beschränktheit ist $\psi \in \mathrm{dom}(T^*)$, und es gilt $0 = \langle (T^*+\mathrm{i})\psi,\phi\rangle = 0$ jetzt für alle $\phi \in \mathcal{H}$ (nach stetiger Fortsetzung), also $(T^*+\mathrm{i})\psi = 0$, Widerspruch. In umgekehrter Reihenfolge gelesen: Ist $\mathrm{im}(T-\mathrm{i})$ dicht, dann hat $0 = \langle\psi,(T-\mathrm{i})\phi\rangle$ für alle $\phi \in \mathrm{dom}(T)$ die einzige Lösung $\psi = 0$, somit $\ker(T^*+\mathrm{i}) = \{0\}$.

Zusätzlich ist T abgeschlossen, d.h. wenn $\phi_n \in \mathrm{dom}(T)$ gegen $\phi \in \mathcal{H}$ konvergiert, und $T\phi_n$ gegen ein $\eta \in \mathcal{H}$ konvergiert, dann gilt $\phi \in \mathrm{dom}(T)$ und $\eta = T\phi$. Somit konvergiert auch $(T-\mathrm{i})\phi_n$ gegen $(T-\mathrm{i})\phi \in \mathrm{im}(T-\mathrm{i})$, d.h. $\mathrm{im}(T-\mathrm{i})$ ist abgeschlossen und damit (wegen der Dichtheit) gleich $\mathcal{H}$.

iii)⇒i) Sei $\phi \in \mathrm{dom}(T^*)$ beliebig. Da $T-\mathrm{i}$ surjektiv ist, gibt es ein $\eta \in \mathrm{dom}(T)$ mit $(T^*-\mathrm{i})\phi = (T-\mathrm{i})\eta$. Wegen $\mathrm{dom}(T) \subseteq \mathrm{dom}(T^*)$ nach Symmetrie gilt $T\eta = T^*\eta$ und deshalb $(T^*-\mathrm{i})(\eta-\phi) = 0$. Nach obiger Bemerkung zur Umkehrung ist aber $\ker(T^*-\mathrm{i}) = \{0\}$, also $\eta = \phi$ und deshalb $\mathrm{dom}(T) = \mathrm{dom}(T^*)$. □

Durch Weglassen der Abgeschlossenheit folgt:

Folgerung 3.2 *Für einen symmetrischen dicht definierten Operator sind äquivalent:*

i) T *ist wesentlich selbstadjungiert*

ii) $\ker(T \pm \mathrm{i}) = \{0\}$

iii) $\mathrm{im}(T \pm \mathrm{i})$ *ist dicht in* $\mathcal{H}$

Wir kommen nun zurück auf die Drehimpuls-Operatoren L_j. Diese sind symmetrisch, surjektiv auf $\mathcal{X}$ (Lösung einer Differentialgleichung), haben also dichtes Bild in $\mathcal{H}$ und sind somit wesentlich selbstadjungiert auf $\mathcal{X}$.

Definition 3.3 Zwei selbstadjungierte dicht definierte Operatoren S,T auf $\mathcal{H}$ *kommutieren*, wenn sie in Theorem 1.7 durch den gleichen unitären Operator $U:\mathcal{H}\to L^2(X,\mu)$ auf dem gleichen Maßraum (X,μ) dargestellt werden können und dort gilt $[\chi_\Omega(S),\chi_{\Omega'}(T)]=0$ für charakteristische Funktionen beliebiger Borel-Mengen Ω,Ω' in (X,μ).

Theorem 3.4 (Z.B Reed-Simon, Bd I, Thm VIII.13) *Zwei selbstadjungierte Operatoren S,T kommutieren genau dann, wenn für ein (und dann alle) $\lambda\in\varrho(S)\cap\varrho(T)$ gilt $[R_\lambda(S),R_\lambda(T)]=0$, oder (folglich und) wenn $[\mathrm{e}^{\mathrm{i}sS},\mathrm{e}^{\mathrm{i}tT}]=0$ für alle $s,t\in\mathbb{R}$.*

Zumindest auf dem dichten Teilraum $\mathcal{X}$ rechnet man folgende Kommutatorrelationen nach:

$$[L_1,L_2]=\mathrm{i}L_3\;,\qquad [L_2,L_3]=\mathrm{i}L_1\;,\qquad [L_3,L_1]=\mathrm{i}L_2\;,\qquad [L^2,L_j]=0\;. \tag{3.3}$$

Die letzte Relation $[L^2,L_j]=0$ setzt sich stetig auf $\mathcal{H}$ fort. Wir können nun das gemeinsame Eigenwertspektrum von (L^2,L_3) ausrechnen:

Satz 3.5 *Angenommen, es gibt ein $0\neq\psi\in\mathcal{X}$ mit $L^2\psi=\lambda\psi$ und $L_3\psi=\mu\psi$. Dann gilt $\lambda=\ell(\ell+1)$ für ein $\ell\in\frac{1}{2}\mathbb{N}$ und $\mu\in\{-\ell,-\ell+1,\dots,\ell-1,\ell\}$.*

Beweis. Für $L_\pm=L_1\pm\mathrm{i}L_2$ gilt $L_\pm^*=L_\mp$ und

$$[L_3,L_\pm]=\pm L_\pm\;,\qquad L^2=L_3^2\mp L_3+L_\pm L_\mp\;. \tag{3.4}$$

Die erste Relation zeigt, daß auch $L_\pm\psi$ Eigenvektor von (L^2,L_3) ist mit $L^2(L_\pm\psi)=\lambda\psi$ und $L_3(L_\pm\psi)=(\mu\pm1)\psi$. Aus der zweiten Relation folgt

$$\|L_\pm\psi\|^2=\langle L_\pm\psi,L_\pm\psi\rangle=\langle\psi,L_\mp L_\pm\psi\rangle=\langle\psi,(L^2-L_3^2\mp L_3)\psi\rangle=\lambda-\mu(\mu\pm1)\|\psi\|^2.$$

Schrittweise Wiederholung des Verfahrens zeigt

$$\|(L_+)^{n+1}\psi\|^2=(\lambda-\mu(\mu+1))(\lambda-(\mu+1)(\mu+2))\cdots(\lambda-(\mu+n)(\mu+n+1))\|\psi\|^2.$$

In der Folge der Norm-Quadrate $(\|(L_+)^n\psi\|^2)_{n\in\mathbb{N}}$ kommt genau dann keine negative Zahl vor, wenn $\lambda=(\mu+m_+)(\mu+m_++1)$ für ein $m_+\in\mathbb{N}$. Analog gilt

$$\|(L_-)^{n+1}\psi\|^2=(\lambda-\mu(\mu-1))(\lambda-(\mu-1)(\mu-2))\cdots(\lambda-(\mu-n)(\mu-n-1))\|\psi\|^2.$$

In der Folge der Norm-Quadrate $(\|(L_-)^n\psi\|^2)_{n\in\mathbb{N}}$ kommt genau dann keine negative Zahl vor, wenn $\lambda=(\mu-m_-)(\mu-m_--1)$ für ein $m_-\in\mathbb{N}$. Beide Bedingungen zusammen liefern $0=\mu(2m_++2m_-+2)+(m_+-m_-)(m_++m_-+1)$

und deshalb $\mu \in \frac{1}{2}\mathbb{Z}$. Daraus folgt $\lambda = \ell(\ell+1)$ für ein $\ell \in \frac{1}{2}\mathbb{N}$ und dann $\mu = m \in \{\ell, \ell-1, \dots, 1-\ell, -\ell\}$. $\square$

Sei nun $\psi_{\ell m} \in \mathcal{X}$ mit $L^2\psi_{\ell m} = \ell(\ell+1)\psi_{\ell m}$, $L_3\psi_{\ell m} = m\psi_{\ell m}$ und $\|\psi_{\ell m}\|^2 = 1$. Diese bilden ein ONS: Ist $m \neq m' \neq 0$, dann

$$\langle \psi_{\ell m}, \psi_{\ell m'} \rangle = \frac{1}{m'} \langle \psi_{\ell m}, L_3 \psi_{\ell m'} \rangle = \frac{1}{m'} \langle L_3 \psi_{\ell m}, \psi_{\ell m'} \rangle = \frac{m}{m'} \langle \psi_{\ell m}, \psi_{\ell m'} \rangle = 0 \; .$$

Ist $\ell \neq \ell' \neq 0$, dann

$$\langle \psi_{\ell m}, \psi_{\ell' m'} \rangle = \frac{\langle \psi_{\ell m}, L^2 \psi_{\ell' m'} \rangle}{\ell'(\ell'+1)} = \frac{\langle L^2 \psi_{\ell m}, \psi_{\ell' m'} \rangle}{\ell'(\ell'+1)} = \frac{\ell(\ell+1)}{\ell'(\ell'+1)} \langle \psi_{\ell m}, \psi_{\ell' m'} \rangle = 0 \; .$$

Im Beweis von Satz 3.5 haben wir nur die Kommutatorrelationen (3.3) sowie Symmetrie und Positivität genutzt. Sieht man sich die konkrete Konstruktion von $L_3 = Q_1P_2 - Q_2P_1$ in Zylinderkoordinaten (r, φ, z) an, so folgt $L_3 = -\mathrm{i}\frac{\partial}{\partial \varphi}$ und deshalb das Eigenwertproblem

$$L_3 \psi_{\ell m}(r, \varphi, z) = m \psi_{\ell m}(r, \varphi, z) = -\mathrm{i} \frac{\partial}{\partial \phi} \psi_{\ell m}(r, \varphi, z)$$

mit Lösung $\psi_{\ell m}(r, \varphi, z) = \Psi_{\ell m}(r, z) e^{\mathrm{i}m\varphi}$. Wegen der Periodizität des Winkels $\varphi \mapsto \varphi + 2\pi$ muß $e^{2\pi \mathrm{i}m} = 1$ gelten, d.h. $m \in \mathbb{Z}$ und dann $\ell \in \mathbb{N}$. Die halben ganzen Zahlen kommen als Eigenwerte des Spin vor, der die gleichen Vertauschungsrelationen (3.3) erfüllt. Wir kommen später darauf zurück.

4 Störungen selbstadjungierter Operatoren

Wir betrachten nun den Hamilton-Operator

$$H = \frac{1}{2} P^2 \pm \frac{1}{\sqrt{Q^2}} \tag{4.1}$$

mit $Q^2 := \sum_{i=1}^3 Q_i^2$, $P^2 := \sum_{i=1}^3 P_i^2$ und der Quadratwurzel nach Funktionalkalkül. Nach Spektraltheorem gilt $\sigma(P^2) = \mathbb{R}_+$. Die Frage, wie der Zusatzterm $\frac{1}{\sqrt{Q^2}}$ die Selbstadjungiertheit modifiziert, wird durch das Kato-Rellich-Theorem beantwortet.

Theorem 4.1 *Sei H_0 selbstadjungiert und H_1 symmetrisch auf $\mathcal{H}$ mit Definitionsbereich* $\mathrm{dom}(H_1) \supseteq \mathrm{dom}(H_0)$. *Falls es reelle Zahlen a, b gibt mit $a < 1$, so daß für alle $\psi \in \mathrm{dom}(H_0)$ gilt*

$$\|H_1 \psi\| \leq a \|H_0 \psi\| + b \|\psi\| \; , \tag{4.2}$$

dann ist $H := H_0 + H_1$ selbstadjungiert mit $\mathrm{dom}(H) = \mathrm{dom}(H_0)$.

Beweis. Wir zeigen, daß für $\lambda > 0$ der Operator $B_\pm := H_1(H_0 \pm \mathrm{i}\lambda)^{-1}$ beschränkt ist mit $\|B_\pm\| < 1$ für λ genügend groß. In diesem Fall ist $\mathrm{id}_{\mathcal{H}} + B_\pm \equiv 1 + B_\pm$ bijektiv mit Inversem gegeben durch die Neumann-Reihe. Nach Theorem 3.1.ii) ist $\frac{H_0}{\lambda} \pm \mathrm{i}$ injektiv, nach Theorem 3.1.iii) surjektiv. Aus $(H \pm \mathrm{i}\lambda) = (1+B_\pm)(H_0 \pm \mathrm{i}\lambda)$ folgt dann, daß $H \pm \mathrm{i}\lambda : \mathrm{dom}(H_0) \to \mathcal{H}$ surjektiv ist. Nach Theorem 3.1 ist dann $\frac{H}{\lambda}$ und somit auch H selbstadjungiert.

Verbleibt der Beweis von $\|B_\pm\| < 1$. Für $\psi \in \mathrm{dom}(H_0)$ gilt $\|(H_0 \pm \mathrm{i}\lambda)\psi\|^2 = \|H_0\psi\|^2 + \lambda^2\|\psi\|^2$, also $\|H_0\psi\|^2 \leq \|(H_0 \pm \mathrm{i}\lambda)\psi\|^2$ und $\|\psi\|^2 \leq \frac{1}{\lambda^2}\|(H_0 \pm \mathrm{i}\lambda)\psi\|^2$. Da $H_0 \pm \mathrm{i}\lambda : \mathrm{dom}(H_0) \to \mathcal{H}$ bijektiv ist, hat jedes $\eta \in \mathcal{H}$ eine Darstellung $\eta = (H_0 \pm \mathrm{i}\lambda)^{-1}\psi$. Somit gilt unter der Voraussetzung (4.2)

$$\begin{aligned}\|B_\pm\eta\| = \|H_1\psi\| \leq a\|H_0\psi\| + b\|\psi\| &\leq a\|(H_0 \pm \mathrm{i}\lambda)\psi\| + \tfrac{b}{\lambda}\|(H_0 \pm \mathrm{i}\lambda)\psi\| \\ &= a\|\eta\| + \tfrac{b}{\lambda}\|\eta\| ,\end{aligned}$$

somit $\|B_\pm\eta\| \leq \|\eta\|$ wegen $a < 1$ und λ genügend groß und deshalb $\|B_\pm\| < 1$. □

Ist $H_0 \geq M$ von unten beschränkt, dann zeigt man durch Ersetzen von $\pm\mathrm{i}\lambda \mapsto M - \epsilon$, daß auch H von unten beschränkt ist mit $H \geq M - \max(\frac{b}{1-a}, a|M| + b)$.

Definition 4.2 Sei $A \in \mathcal{B}(\mathcal{H})$ oder dicht definierter abgeschlossener Operator auf $\mathcal{H}$. Ein Punkt $\lambda \in \sigma(A)$ gehört zum *diskreten Spektrum*, $\lambda \in \sigma_d(A)$, falls λ isolierter Punkt von $\sigma(A)$ ist und $\dim\ker(A - \lambda\,\mathrm{id}_{\mathcal{H}}) < \infty$ ist. Das Komplement $\sigma_{ess}(A) := \sigma(A) \setminus \sigma_d(A)$ heißt *wesentliches Spektrum*.

Nach folgendem Theorem von Weyl ist das wesentliche Spektrum invariant unter relativ kompakten Störungen:

Theorem 4.3 (Z.B. Reed-Simon, Bd. IV, Thm XIII.14+Cor 1) *Seien S, T selbstadjungiert. Falls $R_z(S) - R_z(T)$ kompakt ist für ein (und dann alle) $z \in \varrho(S) \cap \varrho(T)$, dann gilt $\sigma_{ess}(S) = \sigma_{ess}(T)$.*

Es sei bemekt, daß für die Differenz der Resolventen die *zweite Resolventen-Identität* gilt:

$$R_z(T) - R_z(S) = R_z(T)(S - T)R_z(S) . \tag{4.3}$$

Wählen wir $T = H$, $S = H_0$ und $z = \pm\mathrm{i}\lambda$, dann folgt:

Folgerung 4.4 *Seien H_0, H_1 wie in Theorem 4.1 und $B_\pm := H_1(H_0 \pm \mathrm{i}\lambda)^{-1}$ mit $\|B_\pm\| < 1$. Ist $B_\pm$ sogar kompakt, dann gilt $\sigma_{ess}(H_0) = \sigma_{ess}(H)$.*

Wir betrachten nun $H_0 = \frac{1}{2}P^2$ und $H_1 = V(Q)$.

Lemma 4.5 *Sei $\psi \in \mathrm{dom}(P^2) \subseteq L^2(\mathbb{R}^D)$ mit $D \leq 3$. Dann ist $\psi \in L^\infty(\mathbb{R}^D)$, und für jedes $a > 0$ gibt es ein b mit $\|\psi\|_\infty \leq a\|P^2\psi\| + b\|\psi\|$.*

Beweis. Sei zunächst $\psi \in C_0^\infty(\mathbb{R}^D) \cap L^2(\mathbb{R}^D)$ und $\lambda > 0$. Dann gilt nach Fourier-Transformation und Cauchy-Schwarz

$$\begin{aligned}
\|\psi\|_\infty &= \sup_{x\in\mathbb{R}^D} \Big|\frac{1}{(2\pi)^{D/2}}\int_{\mathbb{R}^D} dp\; e^{\mathrm{i}px}\hat{\psi}(p)\Big| \leq \frac{1}{(2\pi)^{D/2}}\int_{\mathbb{R}^D} dp\; \big|\hat{\psi}(p)\big| \\
&= \frac{1}{(2\pi)^{D/2}}\int_{\mathbb{R}^D} dp\; \frac{1}{p^2+\lambda^2}(p^2+\lambda^2)\big|\hat{\psi}(p)\big| \\
&\leq \frac{1}{(2\pi)^{D/2}}\Big(\int_{\mathbb{R}^D} dp \frac{1}{(p^2+\lambda^2)^2}\Big)^{\frac{1}{2}}\Big(\int_{\mathbb{R}^D} dp\; \big|(p^2+\lambda^2)\hat{\psi}(p)\big|^2\Big)^{\frac{1}{2}} \\
&= \frac{1}{(2\pi)^{D/2}\lambda^{4-D}}\Big(\int_{\mathbb{R}^D} dp \frac{1}{(p^2+1)^2}\Big)^{\frac{1}{2}} \cdot \|(P^2+\lambda^2)\psi\|\;,
\end{aligned}$$

wobei im ersten Integral der vorletzten Zeile $p \mapsto \lambda p$ skaliert wurde und im zweiten Integral das Plancherel-Theorem eingesetzt wurde. Wegen der gleichmäßigen Beschränktheit kann ψ auf $\mathrm{dom}(P^2) \subseteq L^2(\mathbb{R}^D)$ fortgesetzt werden. □

Satz 4.6 *Sei $V = V_\infty + V_2$ mit $V_\infty \in L^\infty(\mathbb{R}^3)$ und $V_2 \in L^2(\mathbb{R}^3)$, beide reell. Dann erfüllt $H_1 = V(Q)$ die Voraussetzungen von Theorem 4.1 bezüglich $H_0 = \frac{1}{2}P^2$.*

Beweis. Folgt aus $\|V\psi\| \leq \|V_\infty\|_\infty\|\psi\| + \|\psi\|_\infty\|V\|_2$ und Lemma 4.5. □

Wir zeigen nun, daß unter den gleichen Voraussetzungen $V(Q)(H_0 \pm \mathrm{i}\lambda)^{-1}$ kompakt ist. Dazu erinnern wir an den Faltungssatz der Fourier-Transformation:

$$(\mathcal{F}^{-1}(\hat{f}\hat{g}))(x) = \frac{1}{(2\pi)^{D/2}}(f*g)(x) := \frac{1}{(2\pi)^{D/2}}\int_{\mathbb{R}^D} dy\; f(x-y)g(y)\;. \tag{4.4}$$

Somit folgt

$$(V(Q)(H_0 \pm \mathrm{i}\lambda)^{-1}\psi)(x) = \frac{1}{(2\pi)^{D/2}}\int_{\mathbb{R}} dy\; V(x)r_\lambda(x-y)\psi(y) \quad \text{mit } \widehat{r_\lambda}(p) = \frac{1}{\frac{p^2}{2}\pm\mathrm{i}\lambda}\,.$$

Es gilt $\widehat{r_\lambda} \in L^2(\mathbb{R}^D)$ für $D \leq 3$, somit auch $r_\lambda \in L^2(\mathbb{R}^D)$ nach Plancherel. Ist $V \in L^2(\mathbb{R}^D)$, dann ist $(x,y) \mapsto V(x)r_\lambda(y)$ und nach Transformationssatz auch $(x,y) \mapsto K(x,y) := V(x)r_\lambda(x-y)$ in $L^2(\mathbb{R}^D \times \mathbb{R}^D)$. Man weiß, daß Integralkern-Operatoren $(T\psi)(x) = \int_{\mathbb{R}^D} dy\; K(x,y)\psi(y)$ mit $K \in L^2(\mathbb{R}^D \times \mathbb{R}^D)$ immer kompakt (sogar Hilbert-Schmidt) sind. Mit ein wenig genaueren Abschätzungen läßt sich die Kompaktheit (aber nicht Hilbert-Schmidt) ausdehnen auf Potentiale $V \in L^\infty(\mathbb{R})$, die im Unendlichen verschwinden, $\lim_{\|x\|\to\infty} V(x) = 0$.

Folgerung 4.7 *Der Hamilton-Operator $H = \frac{1}{2}P^2 \pm \frac{1}{\sqrt{Q^2}}$ aus (4.1) ist selbstadjungiert auf $L^2(\mathbb{R}^3)$ mit $\mathrm{dom}(H) = \mathrm{dom}(P^2)$, ist nach unten beschränkt und hat wesentliches Spektrum $\sigma_{ess}(H) = \mathbb{R}_+$.*

Beweis. Sei $B := \{x \in \mathbb{R}^3 \;:\; \|x\| \leq 1\}$ der Einheitsball und χ_B seine charakteristische Funktion, dann gilt $V(x) = \frac{1}{\|x\|} = V_2(x) + V_\infty(x)$ mit $V_2(x) := \frac{\chi_B(x)}{\|x\|} \in L^2(\mathbb{R}^3)$ und $V_\infty(x) := \frac{1-\chi_B(x)}{\|x\|} \in L^\infty(\mathbb{R}^3)$ mit $\lim_{\|x\|\to\infty} V_\infty(x) = 0$. □

Für das positive Vorzeichen gilt $\frac{1}{2}P^2 + \frac{1}{\sqrt{Q^2}} \geq \frac{1}{2}P^2$, so daß dieser Operator keine weiteren Spektralwerte hat. Verbleibt die Bestimmung des in $[-C, 0[$ enthaltenen diskreten Spektrums von $H = \frac{1}{2}P^2 - \frac{1}{\sqrt{Q^2}}$. Wir werden sehen, daß dazu die Eigenschaften des Drehimpuls-Operators genügen. Zunächst gilt $[L_i, P^2] = 0$ und $[L_i, Q^2] = 0$ und deshalb nach Funktionalkalkül auch $[L_i, H] = 0$. Als nächstes wird der Lenz-Runge-Operator eingeführt:

$$A_l := \frac{Q_l}{\sqrt{Q^2}} - \frac{1}{2}\sum_{j,k=1}^{3} \epsilon_{jkl}(P_j L_k + L_k P_j)\;, \qquad l = 1, 2, 3\;. \tag{4.5}$$

Durch elementares (aber längliches) Nachrechnen zeigt man:

Lemma 4.8 (Z.B. Strocci, §5.5+5.6) *Für den Lenz-Runge-Operator gilt:*

$$[L_j, A_k] = \mathrm{i}\sum_{l=1}^{3} \epsilon_{jkl} A_l\;, \qquad 0 = \sum_{j=1}^{3} L_j A_j = \sum_{j=1}^{3} A_j L_j\;,$$

$$[H, A_j] = 0\;, \qquad [A_j, A_k] = -\mathrm{i}\sum_{l=1}^{3} \epsilon_{jkl} L_l H\;,$$

$$A^2 := \sum_{j=1}^{3} A_j^2 = 1 + 2H + 2HL^2\;.$$

Sei $\chi_{\mathbb{R}_-^\times}$ die charakteristische Funktion von $\mathbb{R}_-^\times$. Dann ist $\mathcal{H}_- := \chi_{\mathbb{R}_-^\times}(H)\mathcal{H}$ der Unterraum von $\mathcal{H}$, auf dem der Hamilton-Operator negativ ist. Auf diesem läßt sich der Operator $(-2H)^{-\frac{1}{2}}$ definieren. Da H mit L_j, A_j kommutiert, kommutiert auch $\chi_{\mathbb{R}_-^\times}(H)$ mit L_j, A_j, so daß L_j, A_j den Teilraum $\mathcal{H}_-$ invariant lassen. Somit sind auf $\mathcal{H}_-$ die folgenden Operatoren korrekt erklärt:

$$J_j := \frac{1}{2}\big(L_j + (-2H)^{-\frac{1}{2}} A_j\big)\;, \qquad K_j := \frac{1}{2}\big(L_j - (-2H)^{-\frac{1}{2}} A_j\big)\;. \tag{4.6}$$

Elementares Nachrechnen zeigt mit Lemma 4.8 und $[L_j, L_k] = \mathrm{i}\sum_{l=1}^{3} \epsilon_{jkl} L_l$:

$$[J_j, J_k] = \mathrm{i}\sum_{l=1}^{3} \epsilon_{jkl} J_l\;, \qquad [K_j, K_k] = \mathrm{i}\sum_{l=1}^{3} \epsilon_{jkl} K_l\;,$$

$$[J_j, K_k] = 0\;, \qquad J^2 = K^2 = -\frac{1}{4}(1 + (2H)^{-1})\;. \tag{4.7}$$

Da J (oder K) den Kommutatorrelationen (3.3) eines Drehimpulses genügt, ist das Spektrum von J^2 (oder K^2) nach Satz 3.5 gegeben und somit bewiesen:

Satz 4.9 *Das diskrete Spektrum von* $H = \frac{1}{2}P^2 - \frac{1}{\sqrt{Q^2}}$ *ist enthalten in* $\{-\frac{1}{2(n+1)^2} : n \in \mathbb{N}\}$.

Beweis. $4J^2 + 1$ hat Spektrum $4\ell(\ell+1) + 1 = (2\ell+1)^2$, und $\ell \in \frac{1}{2}\mathbb{N}$. □

Genau genommen ist noch zu zeigen, daß alle Eigenwerte tatsächlich vorkommen.

Allgemein läßt sich zeigen, daß das N-Teilchen Coulomb-Problem neben dem wesentlichen Spektrum $= \mathbb{R}_+$ (=Streuzustände) *diskretes nach unten beschränktes Spektrum* in $\mathbb{R}_-^\times$ hat. Dieses entspricht gebundenen Zuständen (=Atome) und erklärt die experimentell gefundenen diskreten Spektrallinien. Während die Energie im klassischen Coulomb-Problem nach unten unbeschränkt ist und klassische Ladungen nach Energieabstrahlung in den Kern fallen würden, sichert die Quantenmechanik die Stabilität der Materie. Lieb und Koautoren haben dazu detailierte Abschätzungen bewiesen.

5 Die Dirac-Gleichung

In der Quantenmechanik ist die Zeit ein ausgezeichneter *Parameter* und spielt eine gänzlich andere Rolle als der Orts-*Operator*. Der erste Schritt zu einer relativistischen Gleichberechtigung von Raum und Zeit besteht darin, einen in P-linearen Hamilton-Operator zu konstruieren, so daß in der Zeitentwicklung $\mathrm{i}\frac{d}{dt}\psi(t) = H\psi(t)$ räumliche und zeitliche Ableitungen gleichberechtigt sind. Andererseits darf aber die Rotationsinvarianz nicht verletzt werden. Die Lösung dieses Problems wird durch die *Clifford-Algebra* ermöglicht. Wir geben nicht die korrekte mathematische Definition, sondern nutzen die daraus folgende *universelle Eigenschaft*. Aus dieser folgt, daß unsere Konstruktion äquivalent zur Definition ist.

Sei V ein D-dimensionaler reeller Vektorraum mit symmetrischer Bilinearform $g : V \times V \to \mathbb{R}$ (z.B. eine Metrik). Durch eine Konstruktion analog zum fermionischen Fock-Raum bzw. zur CAR-Algebra erweitern wir V zu einer Algebra $C\ell(V,g)$ mit 1. Wir definieren eine Abbildung $\gamma : V \to C\ell(V,g)$ durch

$$\gamma(w)\gamma(w) + \gamma(v)\gamma(w) = 2g(v,w)1 , \tag{5.1}$$

durch die $C\ell(V,g)$ als Vektorraum, und dann als Algebra, eindeutig bestimmt ist. Zu beachten ist, daß in der mathematischen Literatur die rechte Seite als $-2g(v,w)1$ gewählt wird. Da V eine Basis aus Eigenvektoren von g besitzt, gibt es linear unabhängige $e_1, \dots, e_D \in V$, so daß

$$g(e_i, e_j) = \epsilon_i\delta_{ij} \quad \text{mit } \epsilon_i \in \{-1, 0, +1\} . \tag{5.2}$$

Entsprechend folgt für $\gamma(e_i) := \gamma_i$ die Relation $\gamma_i\gamma_j + \gamma_j\gamma_i = 2\epsilon_i\delta_{ij}$. Somit bildet 1 zusammen mit

$$\{\gamma_{i_1}\gamma_{i_2}\cdots\gamma_{i_k} \;:\; 1 \leq i_1 < i_2 \cdots < i_k \leq D\}$$

eine Vektorraum-Basis von $C\ell(V, g)$. Produkte der Basiselemente sind dann aus (5.1) zu erhalten, allgemeine Produkte durch lineare Fortsetzung. Es folgt $\dim(C\ell(V, g)) = 2^D$. Die Clifford-Algebren werden dann klassifiziert durch die Signatur (r, s) von g, d.h. r der ϵ_i in (5.2) sind $+1$ und s der ϵ_i sind -1. Ist $r + s = D$ (dann heißt g *nicht ausgeartet*) und $C\ell_{r,s}$ die Clifford-Algebra zum $r + s$-dimensionalen Vektorraum der Signatur (r, s), dann gilt z.B:

$$\begin{aligned} &C\ell_{0,0} = \mathbb{R}\;, \qquad C\ell_{0,1} = \mathbb{C}\;, \qquad C\ell_{0,2} = \mathbb{H}\;, \\ &C\ell_{4,0} = C\ell_{0,4} = C\ell_{1,3} = M_2(\mathbb{H})\;, \qquad C\ell_{3,1} = M_4(\mathbb{R})\;. \end{aligned} \tag{5.3}$$

Dabei ist $\mathbb{H}$ die Algebra der Quaternionen, ein vierdimensionaler *reeller* Vektorraum mit Basis $(1, \mathrm{i}\sigma_1, \mathrm{i}\sigma_2, \mathrm{i}\sigma_3)$, dessen Produkt sich aus dem Matrix-Produkt der wie folgt dargestellten Basiselemente ergibt:

$$1 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}\;, \quad \mathrm{i}\sigma_1 = \begin{pmatrix} 0 & \mathrm{i} \\ \mathrm{i} & 0 \end{pmatrix}\;, \quad \mathrm{i}\sigma_2 = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ -1 & 0 \end{pmatrix}\;, \quad \mathrm{i}\sigma_3 = \begin{pmatrix} \mathrm{i} & 0 \\ 0 & -\mathrm{i} \end{pmatrix}\;. \tag{5.4}$$

Dagegen werden die komplexifizierten Clifford-Algebren $C\ell_{\mathbb{C}}(V, g) := C\ell(V, g) \otimes \mathbb{C}$ sehr einfach: $C\ell_{\mathbb{C}}(V, g) = M_{2^{D/2}}(\mathbb{C})$ für D gerade und $C\ell_{\mathbb{C}}(V, g) = M_{2^{(D-1)/2}}(\mathbb{C}) \oplus M_{2^{(D-1)/2}}(\mathbb{C})$ für D ungerade.

Man überzeugt sich nun leicht, daß die folgende Teilmenge von $C\ell(V, g)$,

$$\mathrm{Spin}(V, g) := \{\gamma(v_1)\cdots\gamma(v_m) \;:\; m \text{ gerade},\; g(v_i, v_i) = \pm 1\;\forall i\}\;, \tag{5.5}$$

aus invertierbaren Elementen besteht: das Inverse ist einfach $\pm\gamma(v_m)\cdots\gamma(v_1)$. Diese Gruppe heißt die *Spin-Gruppe* von (V, g). Identifizieren wir jetzt V mit $\gamma(V) \subseteq C\ell(V, g)$, dann zeigt eine einfache Rechnung $\mathrm{Ad}_a(v) := a^{-1}va \in V$ für alle $a \in \mathrm{Spin}(V, g)$. Genauer gilt:

Satz 5.1 *Sei g nicht ausgeartet, d.h. $\epsilon_i \neq 0$ in (5.2). Dann gilt:*

i) $\mathrm{Ad}_a(v) = R(v)$ *für ein* $R \in SO(V, g)$, *d.h* $R \in \mathrm{End}(V)$, $\det R > 0$ *und* $g(Rv, Rw) = g(v, w)$,

ii) $\mathrm{Ad} : \mathrm{Spin}(V, g) \to SO(V, g)$ *ist surjektiv mit* $\ker \mathrm{Ad} = \pm 1$.

Man sagt, $\mathrm{Spin}(V, g)$ ist *zweifache Überlagerung* von $SO(V, g)$.

Die Endomorphismen $R \in SO(V, g)$ sind wie folgt gegeben: Ist $(e_1, \ldots, e_D)$ eine Basis mit $g(e_i, e_j) = g_{ij}$, dann gilt für $(Re)_i = \sum_{k=1}^D R_{ik}e_k$

$$g((Re)_i, (Re)_j) = \sum_{k,l=1}^D R_{ik}R_{jl}g_{kl} = (RgR^t)_{ij} \equiv g_{ij} \quad \Rightarrow \quad RgR^t = g\;.$$

Im letzten Schritt fassen wir die g_{ij} als Kompenenten einer Matrix g auf. Sei nun V^* der duale Vektorraum mit durch $e_i^*(e_j) = \delta_{ij}$ definierter dualer Basis $(e_1^*, \dots, e_D^*)$. Diese transformiert sich unter $e_j \mapsto (Re)_j$ als $(R^*e^*)_i = \sum_{k=1}^D (R^*)_{ik} e_k^*$, und aus der Dualität folgt $(R^*e^*)_i((Re)_j) = \sum_{k,l=1}^D (R^*)_{ik} e_k^*(R_{jl}e_l) = \sum_{k=1}^D (R^*)_{ik} R_{jk} \equiv \delta_{ij}$, also $R^* = (R^t)^{-1}$. Für eine R^*-invariante Metrik g^* auf V^* muß deshalb $R^* g^* (R^*)^t = g^*$ gelten, also $(R^t)^{-1} g^* R^{-1} = g^*$ und deshalb $g^* = g^{-1}$.

Definition 5.2 Sei V reeller Vektorraum mit nichtausgearteter symmetrischer Bilinearform g und (V^*, g^{-1}) sein Dualraum mit Clifford-Algebra $\gamma : V^* \to C\ell(V^*, g^{-1})$. Sei (e_j) eine beliebige Basis von V und (e_j^*) die zugehörige duale Basis von V^*. Dann heißt

$$\mathsf{D} := \mathrm{i} \sum_{j=1}^{D} \gamma(e_j^*) \nabla_{e_j} \tag{5.6}$$

der *Dirac-Operator*, wobei ∇_v eine g-kovariante Ableitung in Richtung v ist.

Aus der Linearität von $\gamma : V^* \to C\ell(V^*, g^{-1})$ und der Linearität von ∇_v folgt sofort, daß die Definition von D unabhängig von der Wahl der Basis ist.

Zu klären bleibt, auf welchen Raum der Dirac-Operator wirkt. Ist $\mathcal{S}$ ein Darstellungsraum der $\gamma(e_j^*)$, so können wir $\mathcal{C}^\infty(\mathbb{R}^D, \mathcal{S})$ oder einen geeigneten Abschluß wie $L^2(\mathbb{R}^D, \mathcal{S})$ nehmen, auf dem D ein unbeschränkter selbstadjungierter Operator wird. Die konkrete Wahl von $\mathcal{S}$ hängt von der Signatur (r, s) der Metrik ab. Für $(1, 3)$ und $(4, 0)$ können wir gemäß (5.3) $\mathcal{S} = \mathbb{C}^4$ wählen.

Die Dirac-Gleichung der Quantenmechanik verwendet *nicht* den Dirac-Operator (5.6), da die Zeit ihre ausgezeichnete Rolle behält. Die Fortsetzung der quantenmechanischen Dirac-Gleichung in eine Formel für D war jedoch entscheidend bei der Entwicklung der Quantenfeldtheorie. Ausgangspunkt der Dirac-Gleichung ist die relativistische Beziehung $E^2 = p^2 + m^2$ für die Energie, die wir als Spektrum der Operatorgleichung $H^2 = P^2 + m^2$ auffassen. Auf einem Unterraum mit Eigenwerten $p^2 \ll m^2$ ist die Wurzel näherungsweise gegeben durch $H = (P^2 + m^2)^{\frac{1}{2}} = m + \frac{1}{2m} P^2$ (in den bisherigen Abschnitten zum harmonischen Oszillator und zum Wasserstoffatom hatten wir $m = 1$ gesetzt). Eine andere Wurzel wird durch die *Euklidische* Clifford-Algebra $\gamma_E : \mathbb{R}^4 \to C\ell(\mathbb{R}^4, g_E)$ zu $g(e_i, e_j) = \delta_{ij}$ geliefert:

$$H_{\mathsf{D}} = \sum_{j=1}^{3} \gamma_E(e_j^*) P_{e_j} + \gamma(e_4^*) m \,.$$

Dabei ist $P_{e_j} = -\mathrm{i}\partial_{e_j}$ der Impulsoperator in Richtung e_j. Aus der Kommutativität aller P_{e_j} untereinander und mit dem Skalar m folgt $H_{\mathsf{D}}^2 = P^2 + m^2$. Die

Zeitentwicklung eines Zustands $\psi \in L^2(\mathbb{R}^3, \mathbb{C}^4)$ wird gemäß (1.2) beschrieben durch die *Dirac-Gleichung*

$$\mathrm{i}\frac{d}{dt}\psi(t) = H_{\mathsf{D}}\psi(t) = \Big(\sum_{j=1}^{3} \gamma_E(e_j^*)P_{e_j} + \gamma_E(e_4^*)m\Big)\psi(t) . \tag{5.7}$$

Aus Sicht der Quantenmechanik hat (5.7) ein gravierendes Problem: Wegen $\sigma(P_{e_j}) = \mathbb{R}$ ist das Spektrum von H_{D} *nach unten unbeschränkt*. Der von Dirac vorgeschlagene Ausweg besteht in einer Annahme, die erst in der Quantenfeldtheorie zu rechtfertigen ist: Alle Zustände negativer Energie sind besetzt.

Die Dirac-Gleichung (5.7) wurde nur deshalb nicht sofort verworfen, weil sie als Nebenprodukt den von Pauli aus experimentellen Zwängen eingeführten *Spin* beschreibt. Dieser bewirkt eine Verschiebung des Spektrums in einem äußeren Magnetfeld. Magnetfelder werden durch eine Translation des Impuls-Operators $P_{e_j} \equiv P_j \mapsto P_j + A_j(x)$ beschrieben. Nach (5.3) gilt $\gamma_E(e_k^*) \in M_2(\mathbb{H})$. Eine mögliche Wahl ist (jeder Eintrag ist eine 2×2-Matrix!)

$$\gamma_E(e_j^*) = \begin{pmatrix} 0 & \mathrm{i}\sigma_j \\ -\mathrm{i}\sigma_j & 0 \end{pmatrix} \text{ für } j \in \{1,2,3\} , \qquad \gamma_E(e_4^*) = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}. \tag{5.8}$$

Schreiben wir entsprechend $\psi = \begin{pmatrix} \phi \\ \chi \end{pmatrix}$, wobei ϕ, χ jeweils zwei Komponenten haben, dann entsteht das Eigenwertproblem

$$H_{\mathsf{D}}\psi = \begin{pmatrix} E\phi \\ E\chi \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} m & \sum_{j=1}^{3} \mathrm{i}\sigma_j(P_j + A_j) \\ -\mathrm{i}\sum_{j=1}^{3} \sigma_j(P_j + A_j) & -m \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \phi \\ \chi \end{pmatrix} . \tag{5.9}$$

Für $E \geq 0$ ist $E + m$ invertierbar, so daß die 2. Komponente zu $\chi = \frac{1}{E+m}(-\mathrm{i}\sum_{j=1}^{3} \sigma_j(P_j + A_j))\phi$ gelöst werden kann. Einsetzen in die ersten Komponente liefert dann

$$E\phi = \Big(\frac{1}{E+m}\sum_{j,k=1}^{3} \sigma_j\sigma_k(P_j + A_j)(P_k + A_k) + m\Big)\phi . \tag{5.10}$$

Die Pauli-Matrizen (5.4) erfüllen $\sigma_j\sigma_k = \delta_{jk} + \mathrm{i}\sum_{l=1}^{3} \epsilon_{jkl}\sigma_l$, so daß

$$\sum_{j,k=1}^{3} \sigma_j\sigma_k(P_j + A_j)(P_k + A_k) = P^2 + A^2 + 2A \cdot P + \frac{\mathrm{i}}{2}\sum_{j,k,l=1}^{3} \epsilon_{jkl}[P_j, A_k]\sigma_l$$

mit $P^2 := \sum_{l=1}^{3} P_l^2$, $A^2 := \sum_{l=1}^{3} A_l^2$ und $A \cdot P := \sum_{l=1}^{3} A_l P_l$. Wegen $P_l = -\mathrm{i}\partial_l$ ist $B_l = \frac{\mathrm{i}}{2}\sum_{j,k}^{3} \epsilon_{jkl}[P_j, A_k]$ das Magnetfeld. Nach Eichfixierung $\sum_{\ell=1}^{3} \partial_l(A_l) = 0$ entsteht

$$E\phi = \Big(\frac{(P + A)^2 + B \cdot \sigma}{E + m} + m\Big)\phi , \tag{5.11}$$

wobei $B\cdot\sigma := \sum_{l=1}^3 B_l\sigma_l$. Schreiben wir $E = \tilde{E}+m$, dann folgt auf Unterräumen, in denen das Spektrum von P, A klein gegen m ist, die *Pauli-Gleichung*

$$\tilde{E}\phi \approx \frac{1}{2m}\big((P+A)^2 + B\cdot\sigma\big)\phi\;. \tag{5.12}$$

Die Spin-Operatoren $\frac{\sigma_j}{2}$ erfüllen die gleichen Vertauschungsrelationen (3.3) wie die Drehimpuls-Operatoren L_j, nämlich $\big[\frac{\sigma_j}{2}, \frac{\sigma_k}{2}\big] = \mathrm{i}\sum_{l=1}^3 \epsilon_{jkl}\frac{\sigma_l}{2}$. Offenbar hat $\frac{\sigma_3}{2}$ die Eigenwerte $\pm\frac{1}{2}$, so daß die Spin-Operatoren die halbzahligen Lösungen in Satz 3.5 realisieren.

Wie bereits betont, hat H_{D} zusätzlich zum oben diskutierten Spektrum $E \geq m$ auch das gespiegelte Spektrum $E \leq -m$. Wir postulieren, daß

- es in $\mathcal{H} = L^2(\mathbb{R}^3, \mathbb{C}^4)$ einen ausgezeichneten Zustand Ω gibt (das Vakuum), und
- daß sich jeder Zustand realisieren läßt als $\psi(t,x) = \Psi(t,x)\Omega$ für einen *Feldoperator* $\Psi(t,x)$ auf $\mathcal{H}$.

Nach Multiplikation mit $\gamma_E(e_4^*)$ entsteht dann aus der Dirac-Gleichung (5.7) die *Operator-Gleichung*

$$\Big(\mathrm{i}\gamma_E(e_4^*)\frac{\partial}{\partial t} + \mathrm{i}\sum_{j=1}^3 \gamma_E(e_4^*)\gamma_E(e_j^*)\frac{\partial}{\partial x_j} - m\Big)\Psi(t,x) = 0\;. \tag{5.13}$$

Nun ist leicht zu sehen, daß

$$\gamma_M(e_j^*) := \gamma_E(e_4^*)\gamma_E(e_j^*) \text{ für } j\in\{1,2,3\}\;, \qquad \gamma_M(e_4^*) := \gamma_E(e_4^*)$$

gerade die Clifford-Algebra $C\ell(\mathbb{R}^{4*}, g_M^{-1})$ bezüglich der Minkowski-Metrik

$$g_M(e_4,e_4) = +1\;,\quad g_M(e_j,e_k) = -\delta_{jk}\;,\quad g_M(e_j,e_4) = 0 \quad \text{für } j,k\in\{1,2,3\}$$

der Signatur $(1,3)$ definiert. Somit wird (5.13) die relativistisch kovariante Operatorgleichung $(\mathsf{D}-m)\Psi = 0$, wobei $\mathrm{i}\sum_{j=1}^D \gamma_M(e_j^*)\nabla_{e_j}$ der Dirac-Operator im Minkowski-Raum $(\mathbb{R}^4, g_M)$ ist. Das Vakuum Ω kann nun tatsächlich so gewählt werden, daß ein (korrekt definierter) Hamilton-Operator positiv ist. Die vormaligen Zustände negativer Energie werden dann zu *Antiteilchen* positiver Energie. Wir werden in Beispielen zur Quantenfeldtheorie darauf zurückkommen.

6 Wightman-Axiome

Im Zusammenhang mit der Dirac-Gleichung haben wir gesehen, daß wir Zustände eines relativistisch-kovarianten Systems nicht mehr durch Strahlen im Hilbert-Raum, sondern durch Operatoren auf dem Hilbert-Raum charakterisieren müssen. Im Prinzip ist das schon in der Quantenmechanik möglich. Z.B.

können wir den n-ten Eigenzustand ψ_n des harmonischen Oszillators auch durch den Operator $\Phi_n := \frac{1}{\sqrt{n!}}\big((a^*)^n + a^n\big)$ charakterisieren, denn $\Phi_n\Omega = \psi_n$ mit $\Omega := \psi_0$. Formal geht es also in der Quantenfeldtheorie um Operatoren $\Phi(t,\vec{x})$ mit $t \in \mathbb{R}$ und $\vec{x} \in \mathbb{R}^{D-1}$. Zu berücksichtigen ist jedoch, daß eine L^2-Funktion $\vec{x} \mapsto \Phi(t,\vec{x})\Omega$ in einem einzelnen Punkt gar nicht definiert ist. Nur Mittelungen wie $\Phi(f) := \int_{\mathbb{R}\times\mathbb{R}^{D-1}} d(t,\vec{x})\;\; f(t,\vec{x})\Phi(t,\vec{x})$ können, für geeignete Funktionen f, einen Sinn haben.

Die Formulierung als Objekte in oder auf Hilbert-Räumen, die Feinheiten unbeschränkter Operatoren, die Forderung nach relativistischer Kovarianz und vor allem die *Kausalität* bestimmen die zu fordernden Eigenschaften der Feldoperatoren $\Phi(f)$ nahezu eindeutig. Die Liste wurde in den 50er Jahren erstmals von Wightman und Gårding zusammengestellt und spielt eine zentrale Rolle in den Büchern von Streater-Wightman, Glimm-Jaffe, Reed-Simon Bd II, Strocchi, ... Allerdings werden die Eigenschaften in verschiedener Weise zu Axiomen gruppiert; wir folgen hier einer Konvention von J. Yngvason.

Wir beschränken uns auf den einfachsten Fall eines einkomponentigen Skalarfeldes und erwähnen im Anschluß einige Verallgemeinerungen. Wir schreiben von nun an Vektoren im D-dimensionalen Minkowski-Raum $\mathbb{R}^D$ als $x = (x^0, x^1, \dots, x^{D-1}) = (x^0, \vec{x})$. Diese werden meist als Spalten aufgefaßt (ohne besondere Kennzeichnung). Ferner ist $g = \mathrm{diag}(1, -1, \dots, -1)$ die Metrik der Signatur $(1, D-1)$. Mit $\tilde{x} := gx$ wird $x \cdot \tilde{y} = \langle x, gy\rangle = x^0y^0 - \sum_{j=1}^{D-1} x^j y^j \equiv y \cdot \tilde{x}$ das Minkowski-Skalarprodukt. Zwei Vektoren $0 \neq x, y \in \mathbb{R}^D$ heißen

$$\left.\begin{array}{l} \bullet\ \textit{raumartig} \\ \bullet\ \textit{zeitartig} \\ \bullet\ \textit{lichtartig} \end{array}\right\} \text{ für } (x-y)\cdot\widetilde{(x-y)} \left\{\begin{array}{l} <0 \\ >0 \\ =0 \end{array}\right.$$

Die Teilmenge $\overline{V} := \{p \in \mathbb{R}^D \;:\; p \cdot \tilde{p} \geq 0\}$ heißt *abgeschlossener Lichtkegel*, und $\overline{V_+} := \{p \in \mathbb{R}^D \;:\; p \cdot \tilde{p} \geq 0\;,\; p^0 \geq 0\}$ heißt *abgeschlossener Vorwärtslichtkegel.*

Die Symmetriegruppe des Minkowski-Raums ist die Poincaré-Gruppe $\mathcal{P} = \mathbb{R}^D \rtimes SO(1, D-1)$. Die $SO(1, D-1)$ hat 4 Zusammenhangskomponenten, und wir beschränken uns auf die Untergruppe $SO^{\uparrow}_{+}(1, D-1)$ der orientierungs- und zeitorientierungserhaltenden Lorentz-Transformationen, d.h. jene $\Lambda \in SO(1, D-1)$ mit $\det\Lambda > 0$ und $(1,\vec{0})\Lambda\widetilde{(1,\vec{0})} > 0$. Diese Gruppe läßt das Minkowsi-Skalarprodukt invariant, $x\cdot\tilde{y} = (\Lambda x)\cdot\widetilde{(\Lambda y)}$ wegen $\Lambda^t g \Lambda = g$. Zusammen mit den Translationen in $\mathbb{R}^D$ bilden diese die *orthochrone Poincaré-Gruppe* $\mathcal{P}^{\uparrow}_{+} \ni (a, \Lambda)$ mit Multiplikation $(a_1, \Lambda_1)(a_2, \Lambda_2) = (a_1 + \Lambda_1 a_2, \Lambda_1\Lambda_2)$ und der Wirkung $(a, \Lambda)x = \Lambda x + a$ auf $\mathbb{R}^D$.

Definition 6.1 Eine skalare Quantenfeldtheorie auf $\mathbb{R}^D$ nach Wightman-Gårding ist ein Tupel $(\mathcal{H}, \mathcal{D}, \Phi, U, \Omega)$ mit folgenden Eigenschaften:

[WA0] *Hilbert-Raum-Struktur und Temperiertheit.* $(\mathcal{H}, \langle\ ,\ \rangle)$ ist ein separabler Hilbert-Raum und $\mathcal{D} \subseteq \mathcal{H}$ ein dichter Teilraum. Es gibt ein $\Omega \in \mathcal{D}$ mit $\langle\Omega, \Omega\rangle = 1$ sowie zu jedem $f \in \mathcal{S}(\mathbb{R}^D)$ einen linearen Operator $\Phi(f) : \mathcal{D} \to \mathcal{D}$, so daß

- $f \mapsto \langle \phi, \Phi(f)\psi \rangle$ ist linear und stetig für jedes $\phi, \psi \in \mathcal{D}$.
- $\langle \phi, \Phi(f)\psi \rangle = \langle \Phi(\overline{f})\phi, \psi \rangle$ für alle $\phi, \psi \in \mathcal{D}$.
- $\mathrm{span}(\Phi(f_1) \cdots \Phi(f_N)\Omega \;:\; N \in \mathbb{N}\;,\; f_i \in \mathcal{S}(\mathbb{R}^D))$ ist dicht in $\mathcal{H}$.

[WA1] *Relativistische Kovarianz.* Es gibt eine stark-stetige Darstellung der orthochronen Poincaré-Gruppe $\mathcal{P}_+^\uparrow \ni (a, \Lambda)$ durch unitäre Operatoren $U_{(a,\Lambda)}$ auf $\mathcal{H}$. Diese Operatoren erfüllen $U_{(a,\Lambda)}\mathcal{D} \subseteq \mathcal{D}$, $U_{(a,\Lambda)}\Omega = \Omega$ und

$$U_{(a,\Lambda)}\Phi(f)U^{-1}_{(a,\Lambda)} = \Phi(f^{(a,\Lambda)})\;, \qquad f^{(a,\Lambda)}(y) := f(\Lambda^{-1}(y-a))\;.$$

[WA2] *Spektrumsbedingung.* Für die durch $U_{(a,1)} = \prod_{j=0}^{D-1} e^{\mathrm{i}a_j \cdot \widetilde{P_j}}$ definierten, untereinander kommutierenden, selbstadjungierten Operatoren $P_0, \dots, P_{D-1}$ gilt: P_0 und $M^2 := P_0^2 - \sum_{j=1}^{D-1} P_j^2$ sind positiv.

[WA3] *Mikroskopische Kausalität bzw. Lokalität.* Falls $f, g \in \mathcal{S}(\mathbb{R}^D)$ raumartig getrennten Träger haben, d.h. $f_1(x)f_2(y) = 0$ für alle $x, y \in \mathbb{R}^D$ mit $(x - y) \cdot \widetilde{(x-y)} \geq 0$, dann gilt

$$[\Phi(f_1), \Phi(f_2)]\psi = 0 \quad \text{für alle } \psi \in \mathcal{D}\;.$$

Aus technischen Gründen fordert man manchmal zusätzliche Axiome, die die Beweise stark vereinfachen:

[WA4] *Eindeutigkeit des Vakuums.* Ω ist (bis auf Phase) der einzige Vektor in $\mathcal{H}$ mit $\langle \Omega, \Omega \rangle = 1$ und $U(a,\Lambda)\Omega = \Omega$ für alle $(a, \Lambda) \in \mathcal{P}_+^\uparrow$.

[WA5] *Teilcheninterpretation.* Der Operator $M^2 = P_0^2 - \sum_{j=1}^{D} P_j^2$ hat einen isolierten Eigenwert m^2.

Eine mögliche Verallgemeinerung besteht in der Wahl von K unabhängigen Skalarfeldern $\Phi_1, \dots \Phi_K$ zusammen mit einer Verallgemeinerung der Kovarianz WA1 zu

$$U_{(a,\Lambda)}\Phi_k(f)U^{-1}_{(a,\Lambda)} = \sum_{l=1}^{K} S_{lk}(\Lambda^{-1})\Phi_l(f^{(a,\Lambda)})\;,$$

wobei $S : SO(1, D-1) \to M_K(\mathbb{C})$ eine Darstellung der Lorentz-Gruppe ist. Operatoren $\Psi_\alpha(f)$ für K Fermionen erfordern zwei Anpassungen. Zum einen ist WA1 zu verallgemeinern in

$$U_{(a,\Lambda)}\Psi_\alpha(f)U^{-1}_{(a,\Lambda)} = \sum_{\beta=1}^{K} S_{\beta\alpha}(\tilde{\Lambda}^{-1})\Psi_\beta(f^{(a,\Lambda)})\;,$$

wobei $\tilde{\Lambda} \in \mathrm{Spin}(\mathbb{R}^D, g)$ eines der beiden Urbilder (für $D \neq 3$) von $\Lambda \in SO(1, D-1)$ unter der Abbildung Ad aus Satz 5.1 ist und $S : \mathrm{Spin}(V, g) \to M_K(\mathbb{C})$ eine

Darstellung der Spin-Gruppe ist. Zum anderen ist die Kausalität WA3 für Fermi-Felder zu ändern in $\{\Psi(f_1), \Psi(f_2)\}\psi = 0$ für alle $\psi \in \mathcal{D}$, falls f_1, f_2 raumartig getrennte Träger haben.

Im Rahmen der Wightman-Theorie können einige wichtige Theoreme bewiesen werden.

Theorem 6.2 (Spin-Statistik-Theorem) *Sei $D \geq 4$. Dann hat die jeweils andere Wahl in* [WA3] *(Antikommutator für Bosonen, Kommutator für Fermionen) die einzige Lösung $\Phi_k\Omega = 0$ bzw. $\Psi_\alpha\Omega = 0$.*

Beweis. Streater-Wightman, §4-4, insbesondere Thm 4-10. □

Die Lokalität kann sogar abgeschwächt werden:

Theorem 6.3 *Seien $\mathcal{O}_1, \mathcal{O}_2 \subseteq \mathbb{R}^D$ zwei raumartig getrennte nichtleere abgeschlossene Gebiete. Falls $[\Phi(f_1), \Phi(f_2)] = 0$ für alle $f_1, f_2 \in \mathcal{S}(\mathbb{R})$ mit $\mathrm{supp}(f_1) \subseteq \mathcal{O}_1$ und $\mathrm{supp}(f_2) \subseteq \mathcal{O}_2$, dann folgt bereits* [WA3].

Beweis. Streater-Wightman, Thm 4-1. □

Viele wichtige Eigenschaften können für die *Wightman-Distributionen*

$$\mathcal{W}(f_1, \dots, f_N) := \langle \Omega, \Phi(f_1) \cdots \Phi(f_N)\Omega \rangle$$

bewiesen werden, die wir im übernächsten Abschnitt behandeln. Zunächst geben wir das wichtigste Beispiel: das freie Feld.

7 Das freie Skalarfeld

Das freie Skalarfeld ist das fundamentale Beispiel für die Realisierung aller Wightman-Axiome. Für $D \geq 4$ ist es, neben dem analog zu konstruierenden freien Fermionfeld, das einzige zur Zeit bekannte Beispiel. Modelle für experimentell realistische Quantenfeldtheorien sind im Kontinuum bisher nur als Störungen des freien Feldes zu beschreiben, d.h. als formale, nicht konvergierende Potenzreihen in Operatoren des freien Feldes. Wir folgen im wesentlichen der Darstellung in Reed-Simon Bd. II, Kapitel X.7.

Es sei X_m das obere Impulsraum-Hyperboloid der Masse m,

$$X_m := \{p_m = (\omega_m(\vec{p}), \vec{p}) \in \mathbb{R}^D \ : \ \omega_m(\vec{p}) := +\sqrt{\|\vec{p}\|^2 + m^2}\} ,$$

versehen mit dem Maß

$$\begin{aligned} \int_{X_m} v \, d\mu_m &:= \int_{\mathbb{R}^{D-1}} \frac{d\vec{p}}{2\omega_m(\vec{p})} v(\omega_m(\vec{p}), \vec{p}) \\ &= \int_{\mathbb{R}^{D-1}} d\vec{p} \int_{\mathbb{R}} dp_0 \ \Theta(p_0)\delta(p_0^2 - (\|\vec{p}\|^2 + m^2)) f(p_0, \vec{p}) . \end{aligned} \tag{7.1}$$

Dabei ist $\Theta = \chi_{\mathbb{R}_+}$ die Heaviside-Funktion und δ die Dirac-Distribution. Aus letzterer Darstellung folgt die Lorentz-Invarianz des Maßes, $\int_{\mathbb{R}^{D-1}} \frac{d\vec{p}}{2\omega_m(\vec{p})} v(p_m) = \int_{\mathbb{R}^{D-1}} \frac{d\vec{p}}{2\omega_m(\vec{p})} v(\Lambda^{-1}p_m)$. Es ist sogar (bis auf skalare Vielfache) das einzige Lorentz-invariante Maß auf X_m (Reed-Simon Bd II, Thm IX.37).

Lemma 7.1 *Durch*

$$(U(a,\Lambda)v)(p_m) = e^{\mathrm{i}a\cdot\widetilde{p_m}}\, v(\Lambda^{-1}p_m)$$

wird eine unitäre Darstellung der orthochronen Poincaré-Gruppe $\mathcal{P}_+^\uparrow$ auf dem Hilbert-Raum $L^2(X_m, d\mu_m)$ definiert.

Beweis. Für Punkte $p_m \in X_m$ gilt $p_m \cdot \widetilde{p_m} = m^2$ und deshalb auch $(\Lambda^{-1}p_m)\cdot(\widetilde{\Lambda^{-1}p_m}) = m^2$. Weiter gilt

$$\|U(a,\Lambda)v\|^2 = \int_{\mathbb{R}^{D-1}} \frac{d\vec{p}}{2\omega_m(\vec{p})}\, |v(\Lambda^{-1}p_m)|^2 = \int_{\mathbb{R}^{D-1}} \frac{d\vec{p}}{2\omega_m(\vec{p})}\, |v(p_m)|^2 = \|v\|^2$$

wegen Lorentz-Invarianz des Maßes. Somit ist U eine Isometrie, insbesonere injektiv. Das Produkt zweier Operatoren ist

$$\begin{aligned}
&(U(a,\Lambda_1)U(b,\Lambda_2)v)(p_m)\\
&\qquad = e^{\mathrm{i}a\cdot\widetilde{p_m}}\,(U(b,\Lambda_2)v)(\Lambda_1^{-1}p_m) = e^{\mathrm{i}a\cdot\widetilde{p_m}}e^{\mathrm{i}b\cdot(\widetilde{\Lambda^{-1}p_m})}\, v(\Lambda_2^{-1}\Lambda_1^{-1}p_m)\\
&\qquad = e^{\mathrm{i}(a+\Lambda_1 b)\cdot\widetilde{p_m}} v((\Lambda_1\Lambda_2)^{-1}p_m) = (U(a+\Lambda_1 b, \Lambda_1\Lambda_2)v)(p_m)\ .
\end{aligned}$$

Somit ist U eine Darstellung von $\mathcal{P}_+^\uparrow$, und insbesondere ist U auch surjektiv. □

Wir wählen nun $(\mathcal{H}, \langle\ ,\ \rangle)$ als den Fock-Raum zum Hilbert-Raum $\big(L^2(X_m, d\mu_m), \langle\ ,\ \rangle\big)$. Im folgenden bezeichnen v, w Vekoren aus $L^2(X_m, d\mu_m)$ und ϕ, ψ Vektoren aus $\mathcal{H}$ bzw. $\mathcal{D}$. Ist $(v_n)_{n\in\mathbb{N}}$ eine beliebige ONB in $L^2(X_m, d\mu)$, dann hatten wir in (2.6) ausgehend von einem Vakuum $\Omega \in \mathcal{H}$ die Erzeugungsoperatoren a_n^* auf $\mathcal{H}$ erklärt. Fassen wir nun $a_n^* = a^*(v_n)$ auf, dann wird durch $a^*(v) = a^*\big(\sum_{n=0}^\infty c_n v_n\big) := \sum_{n=0}^\infty c_n a^*(v_n) = \sum_{n=0}^\infty c_n a_n^*$ für $v = \sum_{n=0}^\infty c_n v_n$ eine lineare Abbildung $a^* : L^2(X_m, d\mu_m) \to \mathrm{End}(\mathcal{H})$ erklärt. Damit $a(v)$ der bezüglich des zu definierenden Skalarprodukts zu $a^*(v)$ adjungierte Operator ist, muß die Zuordnung $a : L^2(X_m, d\mu_m) \to \mathrm{End}(\mathcal{H})$ eine *antilineare* Abbildung sein, d.h. $a(v) = a\big(\sum_{n=0}^\infty c_n v_n\big) := \sum_{n=0}^\infty \overline{c_n} a(v_n) = \sum_{n=0}^\infty \overline{c_n} a_n$. Aus den Vertauschungsrelationen $[a_k, a_n^*] = \delta_{nk}$ nach (2.5) folgt somit

$$[a(v), a^*(w)] = \langle v, w\rangle \mathrm{id}_{\mathcal{H}}\ , \qquad [a(v), a(w)] = 0\ , \qquad [a^*(v), a^*(w)] = 0\ . \quad (7.2)$$

Ausgehend von einem Vakuum $\Omega \in \mathcal{H}$ mit $a(v)\Omega = 0$ für alle $v \in L^2(X_m, d\mu_m)$ definieren wir nun

$$\mathcal{D} := \mathrm{span}\Big(a^*(v_1)\cdots a^*(v_k)\Omega\ :\ k \in \mathbb{N}\ ,\ v_1, \dots, v_k \in L^2(X_m, d\mu_m)\Big)\ , \qquad (7.3)$$

mit $a^*(\varnothing)\Omega = \Omega$ für $k = 0$. Das Skalarprodukt wird nun auf $\mathcal{D}$ ausgehend von $\langle\Omega,\Omega\rangle = 1$ eindeutig erklärt durch

$$\langle a^*(v)\phi,\psi\rangle = \langle\phi, a(v)\psi\rangle\;, \quad \langle a(v)\phi,\psi\rangle = \langle\phi, a^*(v)\psi\rangle \quad \text{für beliebige } \phi,\psi\in\mathcal{D}\;.$$

Denn unter Verwendung von (7.2) und $a(v)\Omega = 0$ und $\langle\Omega,\Omega\rangle = 1$ lassen sich beliebige Skalarprodukte in $\mathcal{D}$ eindeutig zurückführen auf Skalarprodukte in $L^2(X_m, d\mu_m)$. Wir definieren nun $\mathcal{H} = \overline{\mathcal{D}}$ als den L^2-Abschluß bezüglich dieses Skalarprodukts.

Für die Basis-Monome folgt aus den Kommutatorrelationen (7.2)

$$\begin{aligned} a(v)a^*(v_1)\cdots a^*(v_n)\Omega &= \sum_{j=1}^n \langle v, v_j\rangle \Big(\prod_{k=1}^{j-1} a^*(v_k)\Big)\Big(\prod_{k=j+1}^{n} a^*(v_k)\Big)\Omega \\ \Rightarrow\quad \|a^*(v_1)\cdots a^*(v_n)\Omega\|^2 &= \sum_{\sigma\in\mathcal{S}_n}\prod_{j=1}^n \langle v_{\sigma(j)}, v_j\rangle \le n!\prod_{j=1}^n \|v_j\|^2\;. \end{aligned} \tag{7.4}$$

Bezeichne

$$\mathcal{D}_n := \operatorname{span}\Big(a^*(v_1)\cdots a^*(v_n)\Omega \;:\; v_1,\dots,v_n\in L^2(X_m,d\mu_m)\Big)$$

den “n-Teilchen”-Unterraum von $\mathcal{D}$, und fassen wir $a^*(v) : \mathcal{D}_n \to \mathcal{D}_{n+1}$ auf, dann ergibt sich[1]

$$\|a^*(v)\|_{\mathcal{B}(\mathcal{D}_n,\mathcal{D}_{n+1})} = \sqrt{n+1}\|v\|\;, \qquad \|a(v)\|_{\mathcal{B}(\mathcal{D}_n,\mathcal{D}_{n-1})} = \sqrt{n}\|v\|\;. \tag{7.5}$$

Wir sehen aus (7.5) aber auch, daß $a^*(v)$ auf $\mathcal{D}$ und erst recht auf $\mathcal{H}$ unbeschränkt ist.

Der Feldoperator $\Phi(f)$ wird in zwei Schritten eingeführt. Als erstes definiert man für $v\in L^2(X_m,d\mu_m)$ den Segal-Operator

$$\Phi_S(v) := a(v) + a^*(v) : \mathcal{D}\to\mathcal{D}\;. \tag{7.6}$$

Zu beachten ist, das Φ_S nur reell-linear, nicht aber $\mathbb{C}$-linear ist. Aus (7.2) folgt

$$[\Phi_S(v),\Phi_S(w)] = \langle v,w\rangle - \langle w,v\rangle = 2\mathrm{i}\,\mathrm{Im}\langle v,w\rangle\;. \tag{7.7}$$

Durch Fourier-Transformation bilden wir zu $f\in\mathcal{S}(\mathbb{R}^D)$ die Operatoren

$$\Phi(f) := \Phi_S(\mathcal{F}_m\,\mathrm{Re}(f)) + \mathrm{i}\Phi_S(\mathcal{F}_m\,\mathrm{Im}(f))\;, \tag{7.8}$$

$$(\mathcal{F}_m f)(p_m) = \frac{1}{(2\pi)^{\frac{D-1}{2}}}\int_{\mathbb{R}^D} dx\; e^{\mathrm{i}p_m\cdot\tilde{x}} f(x)\;, \qquad p_m = (\omega_m(\vec{p}),\vec{p})\;.$$

Die so konstruierten $\Phi(f)$ haben die in [WA0] geforderten Eigenschaften:

[1] *Beweis.* Nach Skalierung können wir $\|v\| = 1$ annehmen. Wir ergänzen $v = v_0$ zu einer ONB (v_k) von $L^2(X_m,d\mu_m)$. Ein Vektor $\psi\in\mathcal{D}_n$ hat dann die Form $\psi = \sum_{k_0+k_1+\dots=n} c_{k_0k_1\dots}(a_0^*)^{k_0}(a_1^*)^{k_1}\cdots\Omega$. Dann ist $\|\psi\|^2 = \sum_{k_0+k_1+\dots=n}|c_{k_0k_1\dots}|^2 k_0!k_1!\cdots$ und $\|a_0^*\psi\|^2 = \sum_{k_0+k_1+\dots=n}|c_{k_0k_1\dots}|^2(k_0+1)!k_1!\cdots \le (n+1)\|\psi\|^2$ mit Gleichheit genau für $\psi = c(a_0^*)^n\Omega$. Die Norm von $a(v)$ folgt durch Adjungieren.

- Die normale D-dimensionale Fourier-Transformation ist eine Isometrie auf $\mathcal{S}(\mathbb{R}^D)$. Stetigkeit der Einschränkung $E_m : \mathbb{R}^D \to X_m$ auf die Hyperfläche X_m wäre falsch für L^2-Funktionen. Da Schwartz-Funktionen $\hat{f}$ jedoch durch $|\hat{f}(p_m)| \leq \frac{\|f\|'_k}{1+\|p_m\|^k}$ abzuschätzen sind mit beliebigem $k > 0$, gilt $\|\mathcal{F}_m f\| \leq C_k \|f\|'_k$ mit einer geeigneten Halbnorm $\| \ \|'_k$ auf $\mathcal{S}(\mathbb{R}^D)$. Zu *festem* $\psi, \phi \in \mathcal{D}$ gibt es ein $n \in \mathbb{N}$ mit $\phi, \psi \in \mathcal{D}_n$. Dann gilt

  $$\langle \phi, \Phi(f)\psi\rangle \leq 2\|\phi\|\sqrt{n+1}(\|\mathrm{Re}\, f\| + \|\mathrm{Im}\, f\|)\,\|\psi\| \leq C\|\phi\|\sqrt{n+1}\|f\|'_k\,\|\psi\|\;,$$

  d.h. $f \mapsto \langle \phi, \Phi(f)\psi\rangle$ ist stetig.

  Die $\mathbb{R}$-Linearität ist klar. Im allgemeinen zerlege man cf in Real- und Imaginärteil, benutze die $\mathbb{R}$-Linearität und füge alles zu $c\langle \phi, \Phi(f)\psi\rangle$ zusammen.

- Sei $f = f_R + \mathrm{i} f_I \in \mathcal{S}(\mathbb{R}^D)$ mit f_R, f_I reell, dann

  $$\begin{aligned}\langle \phi, \Phi(f_R{+}\mathrm{i}f_I)\psi\rangle &= \big\langle \phi, \big(a^*(\mathcal{F}_m f_R) + a(\mathcal{F}_m f_R) + \mathrm{i}a^*(\mathcal{F}_m f_I) + \mathrm{i}a(\mathcal{F}_m f_I)\big)\psi\big\rangle \\ &= \big\langle \big(a(\mathcal{F}_m f_R) + a^*(\mathcal{F}_m f_R) - \mathrm{i}a(\mathcal{F}_m f_I) - \mathrm{i}a^*(\mathcal{F}_m f_I)\big)\phi, \psi\big\rangle \\ &= \langle \Phi(f_R{-}\mathrm{i}f_I)\phi, \psi\rangle\;.\end{aligned}$$

- Die Dichtheit gilt ebenfalls (Reed-Simon, Bd II, Thm X.41.b), ist aber mühsam zu zeigen.

Es verbleibt der Beweis von [WA1]–[WA5].

Satz 7.2 *Die durch* $U_{(a,\Lambda)}\big(a^*(v_1)\cdots a^*(v_k)\Omega\big) := a^*(U_{(a,\Lambda)}v_1)\cdots a^*(U_{(a,\Lambda)}v_k)\Omega$ *und lineare Fortsetzung zunächst auf* $\mathcal{D}$ *und dann auf den Abschluß* $\mathcal{H}$ *definierte Abbildung erfüllt* [WA1] *und* [WA4].

Beweis. Nach Konvention $a^*(\varnothing)\Omega = \Omega$ gilt $U_{(a,\Lambda)}\Omega = \Omega$. Die Darstellungseigenschaft folgt aus der Definition, die Isometrie aus (7.4).

Zunächst gilt mit der oberen Gleichung (7.4)

$$\begin{aligned}U_{(a,\Lambda)}a^*(v)U^{-1}_{(a,\Lambda)}\big(a^*(v_1)\cdots a^*(v_k)\Omega\big) &= a^*(U_{(a,\Lambda)}v)\big(a^*(v_1)\cdots a^*(v_k)\Omega\big), \\ U_{(a,\Lambda)}a(v)U^{-1}_{(a,\Lambda)}\big(a^*(v_1)\cdots a^*(v_k)\Omega\big) &= U_{(a,\Lambda)}\Big(\sum_{j=1}^k \langle v, U^{-1}_{(a,\Lambda)}v_j\rangle\Big(\prod_{k\neq j} a^*(U^{-1}_{(a,\Lambda)}v_k)\Big)\Omega\Big) \\ &= \sum_{j=1}^k \langle U_{(a,\Lambda)}v, v_j\rangle\Big(\prod_{k\neq j} a^*(v_k)\Big)\Omega \\ &= a(U_{(a,\Lambda)}v)\big(a^*(v_1)\cdots a^*(v_k)\Omega\big)\end{aligned}$$

und somit für den Segal-Operator $U_{(a,\Lambda)}\Phi_S(v)U^{-1}_{(a,\Lambda)} = \Phi_S(U_{(a,\Lambda)}v)$. Es verbleibt für reellwerte $f \in \mathcal{S}(\mathbb{R}^D)$ zu berechnen:

$$\begin{aligned}
(U_{(a,\Lambda)}\mathcal{F}_m f)(p_m) &= e^{\mathrm{i}a\cdot\widetilde{p_m}}(\mathcal{F}_m f)(\Lambda^{-1}p_m) = \frac{e^{\mathrm{i}a\cdot\widetilde{p_m}}}{(2\pi)^{\frac{D-1}{2}}}\int_{\mathbb{R}^D} dx\; e^{\mathrm{i}x\cdot\widetilde{\Lambda^{-1}p_m}} f(x) \\
&= \frac{1}{(2\pi)^{\frac{D-1}{2}}}\int_{\mathbb{R}^D} dx\; e^{\mathrm{i}(\Lambda x+a)\cdot\widetilde{p_m}} f(x) \\
&= \frac{1}{(2\pi)^{\frac{D-1}{2}}}\int_{\mathbb{R}^D} dy\; e^{\mathrm{i}y\cdot\widetilde{p_m}} f(\Lambda^{-1}(y-a)) = (\mathcal{F}_m f^{(a,\Lambda)})(p_m)\;.
\end{aligned}$$

Damit ist $U_{(a,\Lambda)}\Phi(f)U^{-1}_{(a,\Lambda)} = \Phi(f^{(a,\Lambda)})$ gezeigt. Per Konstruktion ist Ω der einzige unter $U_{(a,\Lambda)}$ invariante Vektor [WA4]. $\square$

Satz 7.3 *Sei $e_k \in \mathbb{R}^D$ der k-te Standardbasisvektor. Dann gilt für die durch $\tilde{P}^k\psi = -\mathrm{i}\frac{d}{dt}U_{(te_k,1)}\psi$ definierten Erzeugenden*

$$\sigma(P^0) = \{0\} \cup [m,\infty[\;, \qquad \sigma(P\cdot\tilde{P}) = \{0\}\cup\{m^2\}\cup[4m^2,\infty[\;.$$

Insbesondere sind [WA2] *und* [WA5] *erfüllt.*

Beweis. Die Operatoren $U_{(a,\Lambda)}$ lassen die n-Teilchen-Räume $\mathcal{D}_n$ und ihre Abschlüsse $\mathcal{H}_n$ invariant. Deshalb gilt $\sigma(P^0) = \bigcup_{n=0}^\infty \sigma\big(P^0|_{\mathcal{H}_n}\big)$ und $\sigma(P\cdot\tilde{P}) = \bigcup_{n=0}^\infty \sigma\big(P\cdot\tilde{P}|_{\mathcal{H}_n}\big)$. Wegen der Invarianz des Vakuums gilt $P^0|_{\mathcal{H}_0} = 0$ und $P\cdot\tilde{P}|_{\mathcal{H}_0} = 0$; dieses liefert die 0 in den Spektren.

Nach Spektraltheorem 1.7 gibt es eine Darstellung $U : \mathcal{H}_n \to L^2(X,\mu)$ für einen Maßraum (X,μ), in der $U_{(a,1)}$ als punktweise Multiplikation dargestellt ist. Nach einer alternativen Realisierung des Fock-Raums sind das gerade die *symmetrischen* Funktionen auf $X_m^{\times n}$, die bezüglich des Produktmaßes $\prod_{j=1}^n \frac{d\vec{p_j}}{2\omega_m(\vec{p_j})}$ quadratintegrabel sind. Die Abbildung U ist auf den Basis-Monomen wie folgt erklärt:

$$(Ua^*(v_1)\cdots a^*(v_n)\Omega)(p_{m,1},\dots,p_{m,n}) := \frac{1}{\sqrt{n!}}\sum_{\sigma\in\mathcal{S}_n} v_{\sigma(1)}(p_{m,1})\cdots v_{\sigma(n)}(p_{m,n})\;, \tag{7.9}$$

auf $\mathcal{H}_n$ dann durch lineare Fortsetzung. Aus (7.4) folgt die Isometrie von U; Surjektivität folgt per Definition $L^2(X,\mu) := U\mathcal{H}_n$. Aus der Formulierung in Satz 7.2 ergibt sich sofort

$$\big(UU_{(a,\Lambda)}\psi\big)(p_{m,1},\dots,p_{m,n}) \equiv e^{\mathrm{i}a\cdot\sum_{j=1}^n \tilde{p}_{m,j}}(U\psi)(\Lambda^{-1}p_{m,1},\dots,\Lambda^{-1}p_{m,n})\;.$$

Die $U_{(a,1)}$ wirken, wie gefordert, multiplikativ, und es folgt

$$\big(U\tilde{P}^k\psi\big)(p_{m,1},\dots,p_{m,n}) = \Big(\sum_{j=1}^n \tilde{p}^k_{m,j}\Big)(U\psi)(p_{m,1},\dots,p_{m,n})\;.$$

Das Spektrum ist der wesentliche Wertebereich der multiplikativen Funktion $f(p_{m,1},\dots,p_{m,n}) = \sum_{j=1}^n \tilde{p}^k_{m,j}$. Somit lesen wir ab:

$$\sigma\big(P^0|_{\mathcal{H}_n}\big) = \{\omega_m(\overrightarrow{p_1}) + \dots + \omega_m(\overrightarrow{p_n}) \;:\; p_j \in \mathbb{R}^{D-1}\} = [nm,\infty[\;. \qquad (7.10)$$

Das Spektrum $\sigma\big(P\cdot\tilde{P}|_{\mathcal{H}_n}\big)$ ist für $n=1$ grundlegend verschieden von $n>1$. Für $n=1$ gilt

$$\sigma\big(P\cdot\tilde{P}|_{\mathcal{H}_1}\big) = \Big\{(\omega_m(\overrightarrow{p_1}))^2 - \|\overrightarrow{p_1}\|^2 \;:\; \overrightarrow{p_1} \in \mathbb{R}^{D-1}\Big\} = \{m^2\}\;, \qquad (7.11)$$

d.h. das Spektrum besteht aus einem einzigen Punkt. Für $n=2$ erhalten wir

$$\sigma\big(P\cdot\tilde{P}|_{\mathcal{H}_2}\big) = \Big\{(\omega_m(\overrightarrow{p_1}) + \omega_m(\overrightarrow{p_2}))^2 - \|\overrightarrow{p_1}+\overrightarrow{p_2}\|^2 \;:\; \overrightarrow{p_1},\overrightarrow{p_2} \in \mathbb{R}^{D-1}\Big\}\;.$$

Zur weiteren Auswertung benutzt man die Lorentz-Invarianz von $P\cdot\tilde{P} = (\Lambda P)\cdot\widetilde{(\Lambda P)}$. Es ist dann immmer möglich, in das Schwerpunktsystem $\overrightarrow{\Lambda p_1} = -\overrightarrow{\Lambda p_2}$ zu transformieren. Somit entsteht

$$\sigma\big(P\cdot\tilde{P}|_{\mathcal{H}_2}\big) = \Big\{(\omega_m(\overrightarrow{p_1}) + \omega_m(-\overrightarrow{p_1}))^2 \;:\; \overrightarrow{p_1} \in \mathbb{R}^{D-1}\Big\} = [4m^2,\infty[\;. \qquad (7.12)$$

Analog folgt $\sigma\big(P\cdot\tilde{P}|_{\mathcal{H}_n}\big) = [(nm)^2,\infty[$. □

Theorem 7.4 *Die Feldoperatoren $\Phi(f)$ erfüllen das Lokalitätsaxiom* [WA3].

Beweis. Wegen der $\mathbb{C}$-Linearität von Φ genügt der Beweis für *reellwertige* $f_1, f_2 \in \mathcal{S}(\mathbb{R}^D)$ mit raumartig getrenntem Träger. Dann gilt nach (7.7) und (7.8) im Sinn der starken Operator-Topologie (d.h. als Operator auf $\psi \in \mathcal{D}$)

$$\begin{aligned}
[\Phi(f_1),\Phi(f_2)] &= 2\mathrm{i}\,\mathrm{Im}(\langle \mathcal{F}_m f_1, \mathcal{F}_m f_2\rangle) \\
&= \int_{\mathbb{R}^{D-1}} \frac{d\vec{p}}{2\omega_m(\vec{p})} \int_{\mathbb{R}^D\times\mathbb{R}^D} \frac{dx\,dy}{(2\pi)^{D-1}}\; f_1(x) f_2(y)\big(e^{\mathrm{i}p_m\cdot\widetilde{(y-x)}} - e^{-\mathrm{i}p_m\cdot\widetilde{(y-x)}}\big) \\
&= -\mathrm{i}\int_{\mathbb{R}^D\times\mathbb{R}^D} dx\,dy\;\; f_1(x)\Delta_m(x-y)f_2(y) \\
\text{mit } \Delta_m(x) &:= \frac{\mathrm{i}}{(2\pi)^{D-1}} \int_{\mathbb{R}^{D-1}} \frac{d\vec{p}}{2\omega_m(\vec{p})}\big(e^{-\mathrm{i}p_m\cdot\tilde{x}} - e^{\mathrm{i}p_m\cdot\tilde{x}}\big)\;. \qquad (7.13)
\end{aligned}$$

Es genügt zu zeigen, daß die Distribution $\Delta_m(x)$ ihren Träger im abgeschlossenen Lichtkegel hat, d.h. $\Delta_m(x-y) = 0$ für $(x-y)\cdot\widetilde{(x-y)} < 0$. Innerhalb des Lichtkegels $(x-y)\cdot\widetilde{(x-y)} \geq 0$ war aber $f_1(x)f_2(y) = 0$ vorausgesetzt, somit verschwindet der Kommutator.

Wegen der Lorentz-Invarianz des Maßes $d\mu_m$ gilt $\Delta_m(\Lambda x) = \Delta_m(x)$. Wir zeigen im folgenden Lemma: Ist $x\cdot\tilde{x} < 0$, dann gibt es eine orthochrone Lorentz-Transformation Λ mit $\Lambda x = (0,\vec{y})$. Dann folgt aber (Substitution $\vec{p} \mapsto -\vec{p}$)

$$\Delta_m(0,\vec{x}) := \frac{\mathrm{i}}{(2\pi)^{D-1}} \int_{\mathbb{R}^{D-1}} \frac{d\vec{p}}{2\omega_m(\vec{p})}\big(e^{\mathrm{i}\langle\vec{p},\vec{x}\rangle} - e^{-\mathrm{i}\langle\vec{p},\vec{x}\rangle}\big) = 0\;. \qquad \square$$

Lemma 7.5 *Es gibt genau dann eine Lorentz-Transformation* $\Lambda \in SO_+^\uparrow(1, D-1)$ *mit* $(\Lambda x)^0 = 0$ *wenn* $x \cdot \tilde{x} < 0$.

Beweis. Offenbar kann durch räumliche Drehungen R ein beliebiger Vektor $x \in \mathbb{R}^D$ in $Rx = (x^0, \hat{x}^1, 0, \dots, 0)$ überführt werden mit $|\hat{x}^1| = \|\vec{x}\|$. Es genügt deshalb, den Fall $D = 2$ zu behandeln. Dann gehört

$$\Lambda_t = \begin{pmatrix} \cosh t & -\sinh t \\ -\sinh t & \cosh t \end{pmatrix} ,$$

für beliebige $t \in \mathbb{R}$ zur orthochronen Lorentz-Gruppe. Es folgt

$$\Lambda \cdot (x^0, \hat{x}^1)^t = \Big(x^0 \cosh t - x^1 \sinh t, -x^0 \sinh t + x^1 \cosh t\Big)^t .$$

Für $|\hat{x}^1| > |x^0|$, also $(x^0)^2 - |\hat{x}^1|^2 = x \cdot \tilde{x} < 0$, kann die erste Komponente durch Wahl von $\tanh t = \frac{x^0}{\hat{x}^1}$ zu 0 gebracht werden. Wegen $(x^0)^2 \geq x \cdot \tilde{x}$ ist das nicht möglich für $x \cdot \tilde{x} > 0$ und für $x \cdot \tilde{x} = 0$ nur für $x = 0$. □

Schließlich gilt:

Satz 7.6 *Das Quantenfeld* Φ *der so konstruierten Wightman-Theorie* $(\mathcal{H}, \mathcal{D}, \Phi, U, \Omega)$ *erfüllt im distributionellen Sinn die Klein-Gordon-Gleichung,*

$$\Phi\Big(\Big(\frac{\partial^2}{\partial(x^0)^2} - \sum_{j=1}^{D-1} \frac{\partial^2}{\partial(x^j)^2} + m^2\Big) f(x)\Big) = 0 \quad \textit{für alle } f \in \mathcal{S}(\mathbb{R}^D)$$

(und heißt deshalb freies Skalarfeld).

Beweis. Trivial wegen $\mathcal{F}_m\Big(\Big(\frac{\partial^2}{\partial(x^0)^2} - \sum_{j=1}^{D-1} \frac{\partial^2}{\partial(x^j)^2} + m^2\Big) = 0$. □

Wir sehen uns am Ende des nächsten Abschnitts die Wightman-Distributionen des freien Feldes an. Zunächst beweisen wir jedoch jene Eigenschaften, die in jeder Wightman-Theorie gelten.

8 Wightman-Distributionen

Die Vakuum-Erwartungswerte der Feldoperatoren

$$\mathcal{W}_N(f_1, \dots, f_N) := \langle \Omega, \Phi(f_1) \cdots \Phi(f_N)\Omega \rangle \tag{8.1}$$

einer beliebigen Wightman-Quantenfeldtheorie $(\mathcal{H}, \mathcal{D}, \Phi, U, \Omega)$ haben wegen [WA0] zunächst folgende Eigenschaft:

- $\mathcal{W}_N$ ist multilinear und *getrennt-stetig* auf $(\mathcal{S}(\mathbb{R}^D))^N$, d.h. für jedes $j \in \{1, \dots, N\}$ und jedes *fest gewählte* Tupel $f_1, \dots, f_{j-1}, f_{j+1}, \dots, f_N \in \mathcal{S}(\mathbb{R}^D)$ ist die Abbildung

  $$\mathcal{S}(\mathbb{R}^D) \ni f \mapsto \mathcal{W}_N(f_1, \dots, f_{j-1}, f, f_{j+1}, \dots, f_N) \in \mathbb{C} \quad \text{linear und stetig.}$$

Nach dem *Kernsatz von Schwartz* folgt daraus bereits:

i) $\mathcal{W}_N$ besitzt eine eindeutige Fortsetzung zu einer Distribution $\mathcal{W}_N \in (\mathcal{S}(\mathbb{R}^{ND}))'$, die wieder mit $\mathcal{W}_N$ bezeichnet wird (siehe Reed-Simon, Bd I, Thm V.12). Somit ist $\mathcal{W}_N$ sogar *gleichzeitig stetig* in allen f_j.

ii) Diese Distribution definiert einen *Integralkernoperator* (siehe Reed-Simon, Bd I, Thm V.10) $\mathcal{W}_N(x_1, \dots, x_N)$ mit der Eigenschaft

$$\mathcal{W}_N(f_1, \dots, f_N) = \int_{\mathbb{R}^{ND}} d(x_1, \dots, x_N)\, \mathcal{W}_N(x_1, \dots, x_N) \prod_{j=1}^{N} f_j(x_j)\ . \tag{8.2}$$

Definition 8.1 Die auf diese Weise erhaltenen $\mathcal{W}_N \in (\mathcal{S}(\mathbb{R}^{ND}))'$ heißen *Wightman-Distributionen*, oft auch nur *Wightman-Funktionen*, *Korrelationsfunktionen* oder *N-Punktfunktionen*.

Satz 8.2 *Die Folge $\mathcal{W} := (\mathcal{W}_0, \mathcal{W}_1, \mathcal{W}_2, \dots)$, mit $\mathcal{W}_0 = 1$, der Wightman-Distributionen einer Quantenfeldtheorie, welche die Axiome* [WA0]–[WA3] *in Definition 6.1 erfüllen, hat folgende Eigenschaften:*

[WD0] Temperiertheit. $\mathcal{W}_N \in (\mathcal{S}(\mathbb{R}^{ND}))'$.

[WD1] Poincaré-Invarianz. *Für alle $(a, \Lambda) \in \mathcal{P}_+^\uparrow$ gilt*

$$\mathcal{W}_N(\Lambda x_1 + a, \dots, \Lambda x_n + a) = \mathcal{W}_N(x_1, \dots, x_n)\ . \tag{8.3}$$

Zu $\mathcal{W}_N$ existiert eine Distribution $W_N \in (\mathcal{S}(\mathbb{R}^{(N-1)D}))'$ mit

$$\mathcal{W}_N(f) = \int_{\mathbb{R}^D} dx\, W_N(f_{(x)}) \qquad \text{für } f \in \mathcal{S}(\mathbb{R}^{ND})\ , \tag{8.4}$$

$$f_{(x)}(\xi_1, \dots, \xi_{N-1}) := f(x, x-\xi_1, x-\xi_1-\xi_2, \dots, x-\xi_1-\dots-\xi_{N-1})$$

bzw. symbolisch $\mathcal{W}_N(x_1, x_2, \dots, x_N) = W_N(x_1 - x_2, x_2 - x_3, \dots, x_{N-1} - x_N)$.

[WD2] Spektrumsbedingung. *Für die Fourier-Transformation [Vorzeichen ist wichtig!]*

$$\begin{aligned} &\widehat{W_N}(q_1, \dots, q_{N-1}) \\ &:= \frac{1}{(2\pi)^{\frac{(N-1)D}{2}}} \int_{\mathbb{R}^{(N-1)D}} d(\xi_1, \dots, \xi_{N-1})\, e^{\mathrm{i} \sum_{j=1}^{N-1} \xi_j \cdot \tilde{q}_j} W_N(\xi_1, \dots, \xi_{N-1})\ , \end{aligned} \tag{8.5}$$

welche wieder in $(\mathcal{S}(\mathbb{R}^{(N-1)D}))'$ liegt, gilt $\widehat{W_N}(q_1, \dots, q_{N-1}) = 0$, falls ein q_j nicht im Vorwärtslichtkegel $\overline{V_+}$ liegt.

[WD3] Lokalität.

$$\mathcal{W}_N(x_1, \dots, x_j, x_{j+1}, \dots, x_N) = \mathcal{W}_N(x_1, \dots, x_{j-1}, x_{j+1}, x_j, x_{j+2}, \dots, x_N)$$

falls $(x_j - x_{j+1}) \cdot \widetilde{(x_j - x_{j+1})} < 0$.

[WD4] Hermitizität und Positivität. *Es sei $f^{(N)} \in \mathcal{S}(\mathbb{R}^{ND})$ mit $N \in \{1,\dots,K\}$ sowie $f^{(0)} \in \mathbb{C}$ und $f^{(N)} = 0$ für $N \geq K$. Sei $(f^{(N)})^* \in \mathcal{S}(\mathbb{R}^{ND})$ definiert durch $(f^{(N)})^*(x_1,\dots,x_N) := \overline{f^{(N)}(x_N,\dots,x_1)}$ für $N \geq 1$ und $(f^{(0)})^* = \overline{f^{(0)}}$. Dann gilt $\overline{\mathcal{W}_N(f^{(N)})} = \mathcal{W}((f^{(N)})^*)$ sowie*

$$\sum_{N,M=0}^{K} \mathcal{W}_{N+M}((f^{(N)})^* \otimes f^{(M)}) \geq 0 \;, \tag{8.6}$$

mit $(f^{(N)} \otimes f^{(M)})(x_1,\dots,x_N,y_1,\dots,y_M) := f^{(N)}(x_1,\dots,x_N) f^{(M)}(y_1,\dots,y_M)$.

Falls die Wightman-QFT das Axiom [WA4] *erfüllt, gilt außerdem*

[WD5] Clustering. *Für beliebiges $a \in \mathbb{R}^D$ mit $a \cdot \tilde{a} < 0$ gilt*

$$\begin{aligned}
&\lim_{t\to\infty} \mathcal{W}_{N+M}(y_1,\dots,y_N,x_1+ta,\dots,x_N+ta) \\
&\qquad = \mathcal{W}_N(y_1,\dots,y_N)\mathcal{W}_M(x_1,\dots,x_N) \;.
\end{aligned}$$

Beweis. [WD0] ist der Schwartzsche Kernsatz.

[WD1] Schreibt man in (8.1) $\Omega = U_{(a,\Lambda)}\Omega$ (wegen [WA1]) und setzt $\mathrm{id}_H = U_{(a,\Lambda)}U^*_{(a,\Lambda)}$ zwischen $\Phi(f_j)$ und $\Phi(f_{j+1})$, so entsteht mit [WA1]

$$\mathcal{W}_N(f_1,\dots,f_N) = \mathcal{W}_N(f_1^{(a,\Lambda)},\dots,f_N^{(a,\Lambda)}) \;.$$

Für die Integralkerne heißt das

$$\begin{aligned}
&\int_{\mathbb{R}^{ND}} d(x_1,\dots,x_N)\; \mathcal{W}_N(x_1,\dots,x_N) f_1(x_1)\cdots f_N(x_N) \\
&= \int_{\mathbb{R}^{ND}} d(x_1,\dots,x_N)\; \mathcal{W}_N(x_1,\dots,x_N) f_1(\Lambda^{-1}(x_1-a))\cdots f_N(\Lambda^{-1}(x_N-a)) \\
&= \int_{\mathbb{R}^{ND}} d(x_1,\dots,x_N)\; \mathcal{W}_N(\Lambda x_1+a,\dots,\Lambda x_N+a) f_1(x_1)\cdots f_N(x_N) \;.
\end{aligned}$$

Wegen der Hausdorff-Eigenschaft von $\mathcal{S}(\mathbb{R}^D)$ folgt (8.3).

Die Substitutionen $x_N = x_{N-1} - \xi_{N-1}$, $x_{N-1} = x_{N-2} - \xi_{N-2}$, $\dots$, $x_2 = x_1 - \xi_1$ und schließlich $x_1 = x$ führen mit $f(x_1,\dots,x_N) := f_1(x_1)\cdots f_N(x_N)$ und Translationsinvarianz der $\mathcal{W}_N$ auf

$$\begin{aligned}
&\int_{\mathbb{R}^{ND}} d(x_1,\dots,x_N)\; \mathcal{W}_N(x_1,\dots,x_N) f(x_1,\dots,x_N) \\
&= \int_{\mathbb{R}^D} dx \int_{\mathbb{R}^{(N-1)D}} d(\xi_1,\dots,\xi_{N-1})\; \mathcal{W}_N(0,-\xi_1,-\xi_1-\xi_2,\dots,-\xi_1-\dots-\xi_{N-1}) \\
&\qquad\qquad \times f(x,x-\xi_1,x-\xi_1-\xi_2,\dots,x-\xi_1-\dots-\xi_{N-1}) \\
&=: \int_{\mathbb{R}^D} dx \int_{\mathbb{R}^{(N-1)D}} d(\xi_1,\dots,\xi_{N-1})\; W_N(\xi_1,\dots,\xi_{N-1}) f_{(x)}(\xi_1,\dots,\xi_{N-1}) \;.
\end{aligned} \tag{8.7}$$

[WD2] Wir beginnen mit allgemeinen Vorbemerkungen zu projektorwertigen Maßen. Ist T ein unbeschränkter selbstadjungierter Operator, dann gibt es nach Spektraltheorem 1.7 einen unitären Operator $U : \mathcal{H} \to L^2(X,\mu)$ und eine Darstellung

$$(UTU^{-1}\varphi)(t) = t\varphi(t)\;, \qquad t \in \mathbb{R}\,,$$

für alle $\varphi \in U\mathrm{dom}(T)$. Ist $B \subseteq \mathbb{R}$ eine Borel-Menge, dann ist nach Funktionalkalkül der Projektor $\chi_B(T) \in \mathcal{B}(\mathcal{H})$ erklärt durch

$$(U\chi_B(T)U^{-1}\varphi)(t) = \chi_B(t)\varphi(t)\;.$$

Dabei ist $\chi_B(t)\varphi(t) = 0$ falls $B \subseteq \varrho(T)$. Die Eigenschaften der Projektoren χ_B garantieren, daß für beliebiges $\phi \in \mathrm{dom}(T)$ die Zuordnung

$$B \mapsto \langle\phi, \chi_B(T)\phi\rangle$$

ein Borel-Maß auf $\mathbb{R}$ definiert. Ist nun h eine beschränkte Borel-Funktion auf $\mathbb{R}$, dann ist über Grenzwerte von Treppenfunktionen das folgende Integral erklärt:

$$\int_{\mathbb{R}} dt\; h(t) d\langle\phi, \chi_t(T)\phi\rangle =: \langle\phi, h(T)\phi\rangle\;. \tag{8.8}$$

Mittels Polarisationsformeln kann daraus $\langle\phi, h(T)\psi\rangle$ erklärt werden für $\phi,\psi \in \mathrm{dom}(T)$.

Nun zur Spektrumsbedingung. Nach dem Theorem von Stone gilt $U(a,1) = e^{\mathrm{i}a\cdot\tilde{P}}$. Da sämtliche $\chi_{B_j}(P_j)$ miteinander kommutieren, definieren sie eine Familie *gemeinsamer* Projektoren $\mathbb{R}^D \supseteq B \mapsto \chi_B(P) \in \mathcal{B}(\mathcal{H})$. Die Spektrumsbedingung [WA2] besagt nun

$$\chi_B(P)\psi = 0 \qquad \text{für alle } B \subseteq \mathbb{R}^D \setminus \overline{V_+} \text{ und alle } \psi \in \mathcal{D}.$$

In Kombination mit (8.8) entsteht

$$\langle\phi, U(a,1)\psi\rangle = \int_{\overline{V_+}} e^{\mathrm{i}a\cdot\tilde{p}}\, d\langle\phi, \chi_p(P)\psi\rangle \qquad \text{für alle } \phi,\psi \in \mathcal{D}\;. \tag{8.9}$$

Wir betrachten jetzt

$$\begin{aligned}\mathcal{W}_N(f_1,\dots,f_j,f_{j+1}^{(a,1)},\dots,f_N^{(a,1)}) &= \langle\Omega, \Phi(f_1)\cdots\Phi(f_j)U(a,1)\Phi(f_{j+1})\cdots\Phi(f_N)\Omega\rangle \\ &= \int_{\overline{V_+}} e^{\mathrm{i}a\cdot\tilde{p}}\, d\langle\phi_{f_1,\dots,f_j}, \chi_p(P)\psi_{f_{j+1},\dots,f_N}\rangle \end{aligned} \tag{8.10}$$

mit $\psi_{f_{j+1},\dots,f_N} := \Phi(f_{j+1})\cdots\Phi(f_N)\Omega$ und $\phi_{f_1,\dots,f_j} := \Phi(\overline{f_j})\cdots\Phi(\overline{f_1})\Omega$.

Für $h \in \mathcal{S}(\mathbb{R}^D)$ gilt dann unter Verwendung von (8.7)

$$\begin{aligned}
&\int_{\mathbb{R}^D} da\; h(a)\mathcal{W}_N(f_1,\dots,f_j,f_{j+1}^{(a,1)},\dots,f_N^{(a,1)}) \\
&= \int_{\mathbb{R}^D} da \int_{\mathbb{R}^D} dx \int_{\mathbb{R}^{(N-1)D}} d(\xi_1,\dots,\xi_{N-1})\; h(a)f_1(x)W_N(\xi_1,\dots,\xi_{N-1}) \\
&\qquad\qquad\qquad\qquad\qquad \times F_N(\xi_1 - x, \xi_2, \dots, \xi_{j-1}, \xi_j + a, \xi_{j+1}, \dots \xi_{N-1})
\end{aligned}$$

mit $F_N(y_1, \dots y_{N-1}) := \prod_{k=2}^{N} f_k\Big(-\sum_{l=1}^{k} y_l\Big)$.

Bezeichnen wir jetzt mit $(Sh)(a) := h(-a)$ die Spiegelung und führen $(Sh \otimes f_1)(a,x) = (Sh)(a)f_1(x)$ ein, dann können wir folgendes Faltungsintegral definieren:

$$\begin{aligned}
&((Sh \otimes f_1) * F_N)(\xi_1,\dots,\xi_{N-1}) \\
&:= \int_{\mathbb{R}^{2D}} d(a,x)\; (Sh \otimes f_1)(a,x)\, F_N(\xi_1 - x, \xi_2, \dots, \xi_{j-1}, \xi_j - a, \xi_{j+1}, \dots \xi_{N-1}) \,.
\end{aligned}$$

Somit folgt

$$\begin{aligned}
&\int_{\mathbb{R}^D} da\; h(a)\mathcal{W}_N(f_1,\dots,f_j,f_{j+1}^{(a,1)},\dots,f_N^{(a,1)}) \\
&= \int_{\mathbb{R}^{(N-1)D}} d(\xi_1,\dots,\xi_{N-1})\; W_N(\xi_1,\dots,\xi_{N-1})((Sh \otimes f_1) * F_N)(\xi_1,\dots,\xi_{N-1}) \\
&= \int_{\mathbb{R}^{(N-1)D}} d(q_1,\dots,q_{N-1})\; \widehat{W_N}(q_1,\dots,q_{N-1})((Sh \widehat{\otimes f_1)} * F_N)(q_1,\dots,q_{N-1}) \,.
\end{aligned}$$

Im letzten Schritt ist das Parsevalsche Theorem benutzt, welches ebenso für das Paar $\mathcal{S}(\mathbb{R}^K)$ und $(\mathcal{S}(\mathbb{R}^K))'$ gilt. Die Vorzeichen in der Fourier-Transformation müssen dabei entgegengesetzt sein, d.h. wenn wir $\widehat{W_N}(q_1,\dots,q_{N-1})$ wie in [WD2] definieren, dann

$$\begin{aligned}
&((Sh \widehat{\otimes f_1)} * F_N)(q_1,\dots,q_{N-1}) \\
&:= \frac{1}{(2\pi)^{\frac{(N-1)D}{2}}} \int_{\mathbb{R}^{(N-1)D}} d(\xi_1,\dots,\xi_{N-1})\; e^{-\mathrm{i}\sum_{k=1}^{N-1} \xi_j \cdot \tilde{q}_j}((Sh \otimes f_1) * F_N)(\xi_1,\dots,\xi_{N-1}) \,.
\end{aligned}$$

Nach dem Faltungsatz der Fourier-Transformation gilt aber

$$((Sh \widehat{\otimes f_1)} * F_N)(q_1,\dots,q_{N-1}) = (2\pi)^D \widehat{Sh}(q_j)\widehat{f}_1(q_1)\widehat{F_N}(q_1,\dots,q_{N-1}) \,.$$

Multiplizieren wir (8.10) mit $h(a)$ und integrieren über a, so entsteht mit $\int_{\mathbb{R}^D} da\; h(a)e^{\mathrm{i}a\cdot\tilde{p}} = \int_{\mathbb{R}^D} da\; (Sh)(a)e^{-\mathrm{i}a\cdot\tilde{p}} = (2\pi)^{D/2}\widehat{Sh}(p)$ die Identität

$$\begin{aligned}
&(2\pi)^{D/2} \int_{\overline{V_+}} \widehat{Sh}(p)\, d\langle \phi_{f_1,\dots,f_j}, \chi_p(P)\psi_{f_{j+1},\dots,f_N}\rangle \qquad (8.11)\\
&= (2\pi)^D \int_{\mathbb{R}^{(N-1)D}} d(q_1,\dots,q_{N-1})\; \widehat{W_N}(q_1,\dots,q_{N-1})\widehat{Sh}(q_j)\widehat{f}_1(q_1)\widehat{F_N}(q_1,\dots,q_{N-1}) \,.
\end{aligned}$$

Wählen wir jetzt den Träger von $\widehat{Sh}$ im Komplement des Vorwärtslichtkegels $\overline{V_+}$, so ist die linke Seite der Gleichung (8.11) identisch Null für beliebige f_k. Auf der rechten Seite von (8.11) wird $\hat{W}_N$ dann ausgewertet auf einer beliebigen Testfunktion, deren Träger in der j-ten Komponente in $\mathbb{R}^D \setminus \overline{V_+}$ liegt. Da $\mathcal{S}(\mathbb{R}^K)$ die Punkte von $(\mathcal{S}(\mathbb{R}^K))'$ trennt, muß $\widehat{W_N}$ in der j-ten Komponente den Träger in $\overline{V_+}$ haben. Da j beliebig war, folgt die Behauptung.

[WD3] ist klar.

[WD4] Die Hermitizität folgt aus

$$\begin{aligned}\overline{\langle \Omega, \Phi(f_1)\cdots\Phi(f_N)\Omega\rangle} &= \langle \Phi(f_1)\cdots\Phi(f_N)\Omega, \Omega\rangle \\ &= \langle \Omega, \Phi(\overline{f_N})\cdots\Phi(\overline{f_1})\Omega\rangle \;.\end{aligned}$$

Ist zunächst $f^{(N)}(x_1,\dots,x_N) = f_{N1}(x_1)\cdots f_{NN}(x_N)$, dann drückt (8.6) die Tatsache aus, daß

$$\psi_{\underline{f}} := \Big(f_0 + \Phi(f_1) + \sum_{N=2}^{K} \Phi(f_{N1})\cdots\Phi(f_{NN})\Big)\Omega$$

nichtnegative Norm hat, $\langle \psi_{\underline{f}}, \psi_{\underline{f}}\rangle \geq 0$. Nach Fortsetzung über den Schwartzschen Kernsatz folgt die Aussage für alle $f^{(N)} \in \mathcal{S}(\mathbb{R}^{ND})$.

[WD5] wird z.B. in Streater-Wightman, Thm 3-4, unter der (nicht notwendigen, aber den Beweis stark vereinfachenden) Annahme [WA5] bewiesen. □

Im Fall mehrkomponentiger Felder und/oder von Fermi-Feldern gibt es offensichtliche Modifikationen von [WD1] und [WD3].

Wir beweisen im nächsten Abschnitt folgende wichtige Umkehrung von Satz 8.2: Ist eine Folge $\mathcal{W} := (\mathcal{W}_0, \mathcal{W}_1, \mathcal{W}_2, \dots)$ mit $\mathcal{W}_0 = 1$ gegeben, welche [WD0]–[WD4] erfüllt, so konstruiert man eine Wightman-Theorie $(\mathcal{H}, \mathcal{D}, \Phi, U, \Omega)$, die [WA0]–[WA3] erfüllt. Wir können also den Unterbau von Operatoren auf Hilbert-Räumen vergessen und uns allein mit den Wightman-Distributionen befassen. Es stellt sich heraus, daß die $\mathcal{W}_N$ eine Fortsetzung ins Komplexe besitzen, welche einerseits das PCT-Theorem beweist und andererseits eine Euklidische Quantenfeldtheorie definiert. Auch hier gilt die Umkehrung: erfüllt die Euklidische Quantenfeldtheorie einen Satz von Axiomen, so rekonstruiert man die $\mathcal{W}_N$ und somit auch eine Wightman-Theorie. Dieses Verfahren ist der Schlüssel zur Konstruktion weiterer Modelle neben dem freien Feld.

Der Vollständigkeit halber sehen wir uns noch kurz die Wightman-Distributionen des freien Feldes an. Für reellwertige f_1, f_2 erhalten wir:

$$\begin{aligned}\mathcal{W}_2(f_1,f_2) &= \langle \Omega, a(\mathcal{F}_m f_1) a^*(\mathcal{F}_m f_2)\Omega\rangle = \langle \Omega, \langle \mathcal{F}_m f_1, \mathcal{F}_m f_2\rangle \Omega\rangle = \langle \mathcal{F}_m f_1, \mathcal{F}_m f_2\rangle \\ &= \int_{\mathbb{R}^{D-1}} \frac{d\vec{p}}{2\omega_m(\vec{p})} \int_{\mathbb{R}^D\times\mathbb{R}^D} \frac{dx\,dy}{(2\pi)^{D-1}}\; f_1(x) f_2(y) e^{-\mathrm{i}p_m\cdot\widetilde{(x-y)}} \;.\end{aligned}$$

Nach Konstruktion der Feldoperatoren bleibt die Gleichheit zwischen dem ersten und letzten Ausdruck auch für komplexe f_i bestehen. Im distributionellen Sinn folgt somit

$$\begin{aligned}
\mathcal{W}_2(x,y) &= -\mathrm{i}\Delta_m^+(x-y) \quad \Leftrightarrow \quad W_2(\xi) = -\mathrm{i}\Delta_m^+(\xi) \\
\text{mit} \quad \Delta_m^+(\xi) &:= \frac{\mathrm{i}}{(2\pi)^{D-1}} \int_{\mathbb{R}^{D-1}} \frac{d\vec{p}}{2\omega_m(\vec{p})}\, e^{-\mathrm{i}\xi\cdot\widetilde{p_m}} \,. \qquad (8.12)
\end{aligned}$$

Wir können nochmals die Trägereigenschaften (zumindest formal) bestätigen. Ausgedrückt als D-dimensionales Integral folgt mit der distributionellen Identität $\delta(p-q) = \frac{1}{(2\pi)^D}\int_{\mathbb{R}^D} d\xi\; e^{\mathrm{i}\xi\cdot\widetilde{(p-q)}}$

$$\begin{aligned}
\tilde{W}_2(q) &:= \frac{-\mathrm{i}}{(2\pi)^{\frac{D}{2}}} \int_{\mathbb{R}^D} d\xi\; e^{\mathrm{i}\xi\cdot\tilde{q}}\Delta_m^+(\xi) \\
&= \frac{1}{(2\pi)^{\frac{3D}{2}-1}} \int_{\mathbb{R}^{2D}} d(p,\xi)\; \Theta(p^0)\delta(p\cdot\tilde{p}-m^2)\; e^{\mathrm{i}\xi\cdot\widetilde{(q-p)}} \\
&= \frac{1}{(2\pi)^{\frac{D}{2}-1}} \Theta(q^0)\delta(q\cdot\tilde{q}-m^2) \,.
\end{aligned}$$

Somit ist $\tilde{W}_2(q)$ eine Distribution, deren (singulärer) Träger das obere Hyperboloid zur Masse m ist, und dieses liegt im Vorwärtslichtkegel. Es gilt sogar folgende bemerkenswerte Verallgemeinerung:

Theorem 8.3 (Källén-Lehmann) *Sei $W_2(\xi)$ die 2-Punktfunktion einer beliebigen Wightman-QFT mit $\mathcal{W}_1(f) = 0$. Dann gibt es ein polynomial beschränktes Maß ρ auf $\mathbb{R}_+$ mit*

$$\begin{aligned}
W_2(\xi) &= \int_0^\infty d\rho(m)\; (-\mathrm{i}\Delta_m^+(\xi)) \\
\Leftrightarrow \qquad W_2(f) &= \frac{1}{(2\pi)^{\frac{D}{2}-1}} \int_0^\infty d\rho(m) \int_{\mathbb{R}^{D-1}} \frac{d\vec{p}}{2\omega_m(\vec{p})}\; \hat{f}(\widetilde{p_m}) \,.
\end{aligned}$$

Beweis. Reed-Simon, Bd II, Thm IX.34. □

Nun zu $N \neq 2$. Wegen $a(v)\Omega = 0$ gilt $\mathcal{W}_1(f) = 0$ für alle f. Seien zunächst alle f_i reell. Dann gilt wegen $a(v)\Omega = 0$ und $[a^*(v), a^*(w)] = 0$

$$\begin{aligned}
\mathcal{W}_N(f_1,\dots,f_N) &= \langle\Omega, \Phi(f_1)\cdots\Phi(f_{N-1})a^*(\mathcal{F}_m f_N)\Omega\rangle \\
&= \sum_{j=1}^{N-1} \langle\Omega, \Phi(f_1)\cdots\Phi(f_{j-1})\big[\Phi(f_j), a^*(\mathcal{F}_m f_N)\big]\Phi(f_{j+1})\cdots\Phi(f_{N-1})\Omega\rangle \\
&= \sum_{j=1}^{N-1} \langle\mathcal{F}_m f_j, \mathcal{F}_m f_N\rangle\langle\Omega, \Phi(f_1)\cdots\Phi(f_{j-1})\Phi(f_{j+1})\cdots\Phi(f_{N-1})\Omega\rangle \\
&= \sum_{j=1}^{N-1} \mathcal{W}_2(f_j, f_N)\mathcal{W}_{N-2}(f_1,\dots f_{j-1}, f_{j+1}\dots, f_{N-1}) \,.
\end{aligned}$$

Rekursion im jeweils rechten f_k liefert:

Satz 8.4 *Für die N-Punktfunktion des freien Feldes gilt:*

$$\mathcal{W}_N(f_1,\dots,f_N) = \begin{cases} 0 & \text{für } N \text{ ungerade} \\ \displaystyle\sum_{\text{Paarungen } i_k<j_k} \mathcal{W}_2(f_{i_1},f_{j_1})\cdots\mathcal{W}_2(f_{i_{\frac{N}{2}}},f_{j_{\frac{N}{2}}}) & \text{für } N \text{ gerade} \end{cases}$$

Die Summe läuft über die $(N-1)(N-3)\cdots 1 = \frac{N!}{2^{\frac{N}{2}}(\frac{N}{2})!}$ verschiedenen Partitionen von $\{1,\dots,N\}$ in $\frac{N}{2}$ Paare. □

Wegen der Faktorisierung der höheren N-Punktfunktionen in Produkte von 2-Punktfunktionen wird die Quantenfeldtheorie zum freien Feld als *trivial* bezeichnet. Wegen der Abschätzung $|\mathcal{W}_2(f_1,f_2)| \leq C^2\|f_1\|'\|f_2\|'$ für geeignete Halbnormen auf $\mathcal{S}(\mathbb{R}^D)$ folgt

$$|\mathcal{W}_N(f_1,\dots,f_N)| \leq C^N\sqrt{N!}\|f_1\|'\cdots\|f_N\|' \,.$$

9 Das Wightmansche Rekonstruktionstheorem

Wir kommen nun zur Umkehrung von Satz 8.2:

Theorem 9.1 (Wightman) *Sei $\mathcal{W} := (\mathcal{W}_0,\mathcal{W}_1,\mathcal{W}_2,\dots)$ eine Folge von Distributionen, für die die Eigenschaften* [WD0]–[WD4] *aus Satz 8.2 gelten. Dann gibt es eine Wightman-QFT $(\mathcal{H},\mathcal{D},\Phi,U,\Omega)$, die die Axiome* [WA0]–[WA3] *aus Definition 6.1 erfüllt und aus der sich die $\mathcal{W}_N$ wie in (8.1) ergeben. Gilt zusätzlich* [WD5]*, so folgt auch* [WA4]*, und die Wightman-QFT ist bis auf unitäre Äquivalenz eindeutig bestimmt.*

Beweis. [WA0] Es sei $\mathcal{A}$ die Menge der endlichen Folgen $\underline{f} := (f^{(0)},f^{(1)},\dots,f^{(K)},0,\dots)$, bestehend aus $f^{(0)}\in\mathbb{C}$ und $f^{(N)}\in\mathcal{S}(\mathbb{R}^{ND})$. Dann gilt:

- $\mathcal{A}$ ist ein Vektorraum bezüglich
$$\underline{f_1}+c\underline{f_2} := (f_1^{(0)}+cf_2^{(0)}, f_1^{(1)}+cf_2^{(1)}, f_1^{(2)}+cf_2^{(2)},\dots)\,.$$
Die Familien von Halbnormen auf $\mathcal{S}(\mathbb{R}^{ND})$ induzieren eine lokal-konvexe Hausdorff-Topologie auf $\mathcal{A}$.
- $\mathcal{A}$ ist eine Algebra, die *Borchers-Uhlmann-Algebra*, bezüglich
$$(\underline{f_1}\otimes\underline{f_2})^{(M)} = \sum_{N=0}^{M} f_1^{(N)}\otimes f_2^{(M-N)}\,,$$
$$(f_1^{(N)}\otimes f_2^{(M-N)})(x_1,\dots,x_M) := f_1^{(N)}(x_1,\dots,x_N)f_2^{(M-N)}(x_{N+1},\dots,x_M)\,.$$
Es gelten alle Assoziativ- und Distributivgesetze. Die Folge $\underline{1} := (1,0,\dots)$ ist das Einselement.

- Auf $\mathcal{A}$ ist eine Involution erklärt durch

$$(f^{(0)}, f^{(1)}, f^{(2)}, \dots)^* := \big(\overline{f^{(0)}}, (f^{(1)})^*, (f^{(2)})^*, \dots\big) ,$$
$$(f^{(N)})^*(x_1, \dots, x_N) := \overline{(f^{(N)})(x_N, \dots, x_1)} .$$

  Es gilt $(\underline{f_1} \otimes \underline{f_2})^* = (\underline{f_2})^* \otimes (\underline{f_1})^*$.

Dann definiert

$$\mathcal{W}(\underline{f}) := \sum_{N=0}^{\infty} \mathcal{W}_N(f^{(N)}) \tag{9.1}$$

(die Summe ist endlich) einen *Zustand* auf $\mathcal{A}$, d.h. $\mathcal{W} : \mathcal{A} \to \mathbb{C}$ ist

- lineares stetiges (wegen [WD0]),
- positives ($\mathcal{W}(\underline{f}^* \otimes \underline{f}) \geq 0$ wegen [WD4])
- und normiertes ($\mathcal{W}(\underline{1}) = 1$)

Funktional. Insbesondere (Übungen Blatt 2, Aufgabe 3) gilt $\overline{\mathcal{W}(\underline{f})} = \mathcal{W}(\underline{f}^*)$ sowie die Ungleichung von Cauchy-Schwarz

$$\big|\mathcal{W}(\underline{f_1}^* \otimes \underline{f_2})\big|^2 \leq \mathcal{W}(\underline{f_1}^* \otimes \underline{f_1})\mathcal{W}(\underline{f_2}^* \otimes \underline{f_2}) . \tag{9.2}$$

Der Hilbert-Raum wird jetzt durch *GNS-Konstruktion* aus $(\mathcal{A}, \mathcal{W})$ erhalten (nach Gelfand-Naimark-Segal). Sei

$$\mathcal{I} := \{\underline{g} \in \mathcal{A} \ : \ \mathcal{W}(\underline{g}^* \otimes \underline{g}) = 0\} .$$

Der Quotientenraum $\mathcal{D} := \mathcal{A}/\mathcal{I}$ der Äquivalenzklassen $[\underline{f}] = \underline{f} + \mathcal{I}$ ist ein Vektorraum, dessen Nullelement durch $[\underline{0}] = \mathcal{I}$ gegeben ist. Nach Cauchy-Schwarz (9.2) hängt $\mathcal{W}(\underline{f_1}^* \otimes \underline{f_2})$ nur von der Klasse ab ($\mathcal{W}(\underline{f}^* \otimes \mathcal{I}) = 0 = \mathcal{W}(\mathcal{I}^* \otimes \underline{f})$ für alle $\underline{f} \in \mathcal{A}$) und definiert deshalb ein *Skalarprodukt* auf $\mathcal{D}$:

$$\langle [\underline{f_1}], [\underline{f_2}] \rangle := \mathcal{W}(\underline{f_1}^* \otimes \underline{f_2}) . \tag{9.3}$$

Wir definieren

$$\mathcal{H} := \overline{\mathcal{D}} \quad \text{(d.h. } L^2\text{-Abschluß bzgl. } \langle\ ,\ \rangle), \qquad \Omega := [\underline{1}] . \tag{9.4}$$

Wieder wegen Cauchy-Schwarz ist eine Linksmultiplikation von $\mathcal{A}$ mit $\mathcal{D}$ erklärt:

$$\underline{f}[\underline{\psi}] := [\underline{f} \otimes \underline{\psi}] ,$$

denn $\underline{f} \otimes \mathcal{I} \in \mathcal{I}$ wegen $|\mathcal{W}((\underline{f} \otimes \mathcal{I})^* \otimes \underline{f} \otimes \mathcal{I})|^2 = |\mathcal{W}(\mathcal{I}^* \otimes (\underline{f}^* \otimes f \otimes \mathcal{I}))|^2 = 0$. Damit können wir zu $h \in \mathcal{S}(\mathbb{R}^D)$ eine Abbildung

$$\Phi(h) : \mathcal{D} \to \mathcal{D} , \qquad \Phi(h)\psi := (0, h, 0, 0, \dots)\psi \quad \text{für } \psi = [\underline{\psi}] \in \mathcal{D} \tag{9.5}$$

erklären. Für feste $[\underline{\phi}], [\underline{\psi}] \in \mathcal{D}$ folgt

$$\langle[\underline{\phi}], \Phi(h)[\underline{\psi}]\rangle = \sum_{N,M=0}^{K} \mathcal{W}_{N+M+1}\big((\phi^{(N)})^* \otimes h \otimes (\psi^{(M)})^*\big) \,. \tag{9.6}$$

Wegen [WD0] ist $h \mapsto \langle[\underline{\phi}], \Phi(h)[\underline{\psi}]\rangle$ stetig, und es gilt $\langle[\underline{\phi}], \Phi(h)[\underline{\psi}]\rangle = \langle\Phi(\overline{h})[\underline{\phi}], [\underline{\psi}]\rangle$.

Durch Entwicklung nach Eigenfunktionen des harmonischen Oszillators folgt, daß jedes $f^{(N)} \in \mathcal{S}(\mathbb{R}^{ND})$ durch Linearkombination von $h_1 \otimes \cdots \otimes h_N$ approximiert werden kann, mit $h \in \mathcal{S}(\mathbb{R}^D)$. Somit sind Linearkombinationen von $\Phi(h_1)\cdots\Phi(h_N)\Omega = [h_1 \otimes \cdots \otimes h_N]$ dicht in $\mathcal{D}$ und damit auch in $\mathcal{H} = \overline{\mathcal{D}}$. Insgesamt ist [WA0] bewiesen.

[WA1] Wir definieren $U_{(a,\Lambda)}[\underline{\psi}]$ als $[U_{(a,\Lambda)}\underline{\psi}]$ mit

$$(U_{(a,\Lambda)}\underline{\psi})^{(N)}(x_1, \dots, x_N) := \psi^{(N)}(\Lambda^{-1}(x_1 - a), \dots, \Lambda^{-1}(x_N - a))$$

für $N \geq 1$ und $U_{(a,\Lambda)}\psi^{(0)} = \psi^{(0)}$. Insbesondere folgt $U_{(a,\Lambda)}\Omega = \Omega$. Die Darstellungseigenschaft ist leicht nachzurechnen, die Isometrie folgt aus [WD1]:

$$\begin{aligned}
&\langle U_{a,\Lambda}[\underline{\phi}], U_{a,\Lambda}[\underline{\psi}]\rangle \\
&= \sum_{M,N=0}^{\infty} \int_{\mathbb{R}^{(N+M)D}} d(x_1, \dots, x_N, y_1, \dots, y_M) \mathcal{W}_{N+M}(x_1, \dots, x_N, y_1, \dots, y_M) \\
&\qquad \times \overline{\phi^{(N)}(\Lambda^{-1}(y_N - a), \dots, \Lambda^{-1}(y_1 - a))}\psi^{(M)}(\Lambda^{-1}(x_1 - a), \dots, \Lambda^{-1}(x_M - a)) \\
&= \sum_{M,N=0}^{\infty} \int_{\mathbb{R}^{(N+M)D}} d(x_1, \dots, x_N, y_1, \dots, y_M) \mathcal{W}_{N+M}(x_1, \dots, x_N, y_1, \dots, y_M) \\
&\qquad \times \overline{\phi^{(N)}(y_N, \dots, y_1)}\psi^{(M)}(x_1, \dots, x_M) \\
&= \langle[\underline{\phi}], [\underline{\psi}]\rangle \,.
\end{aligned}$$

Nach Konstruktion gilt

$$U_{(a,\Lambda)}\Phi(h)U^{-1}_{(a,\Lambda)}[\psi] = [h^{(a,\Lambda)} \otimes \psi] = \Phi(h^{(a,\Lambda)})[\psi] \,.$$

[WA2] Ohne Berücksichtigung von Träger-Eigenschaften lautet das allgemein gültige Analogon von (8.11)

$$\begin{aligned}
&(2\pi)^{D/2} \int_{\mathbb{R}^D} \widehat{Sh}(p)\, d\langle[\underline{\phi}], \chi_p(P)[\underline{\psi}]\rangle \qquad (9.7)\\
&= (2\pi)^D \sum_{N,M=0}^{\infty} \int_{\mathbb{R}^{(N-1)D}} d(q_1, \dots, q_{N+M-1})\, \widehat{W_N}(q_1, \dots, q_{N+M-1})\widehat{Sh}(q_N)\widehat{F_{\phi^{(N)},\psi^{(M)}}} \,,
\end{aligned}$$

wobei $F_{\phi^{(N)},\psi^{(M)}} \in S(\mathbb{R}^{(N+M-1)})$ in einer Weise aus $\phi^{(N)}, \psi^{(M)}$ entsteht, die analog zur Konstruktion von $f_1 * F_N$ im Beweis von (8.11) ist. Wählen wir jetzt den Träger von $\widehat{Sh}(q_N)$ in $\mathbb{R}^D \setminus \overline{V_+}$, so verschwindet jetzt die *rechte Seite* von (9.7) wegen [WD2], während sich das Integral auf der linken Seite von (9.7) auf $\mathbb{R}^D \setminus \overline{V_+}$ reduziert. Dieses Integral kann aber nur dann Null ergeben für alle solche $\widehat{Sh}$ sowie alle $[\underline{\phi}], [\underline{\psi}] \in \mathcal{D}$, wenn $\chi_B(P)[\underline{\psi}] = 0$ ist für eine beliebige Borel-Menge $B \subseteq \mathbb{R}^D \setminus \overline{V_+}$ und alle $[\underline{\phi}], [\underline{\psi}] \in \mathcal{D}$. Somit liegt das gemeinsame Spektrum von P in $\overline{V_+}$.

[WA3] folgt direkt aus [WD3].

[WA5] Angenommen, es gibt einen weiteren, von Ω linear unabhängigen Poincaré-invarianten Vektor $\Omega' \in \mathcal{H}$ mit $\|\Omega\| = 1$. Dieser kann nach $\Omega' \mapsto \frac{\Omega' - \langle \Omega, \Omega' \rangle \Omega}{\|\Omega' - \langle \Omega, \Omega' \rangle \Omega\|}$ als zu Ω orthonormal angenommen werden. Zu jedem $\epsilon > 0$ gibt es ein $\Omega_{\mathcal{D}} \in \mathcal{D}$ mit $\|\Omega_{\mathcal{D}} - \Omega'\| < \epsilon$, wobei $\|\Omega_{\mathcal{D}}\| = 1$ gewählt werden kann. Es folgt

$$
\begin{aligned}
1 &= \langle \Omega', \Omega' \rangle = \langle \Omega', U_{(a,1)} \Omega' \rangle \\
&= \langle \Omega' - \Omega_{\mathcal{D}}, U_{(a,1)} \Omega' \rangle + \langle \Omega_{\mathcal{D}}, U_{(a,1)} (\Omega' - \Omega_{\mathcal{D}}) \rangle + \langle \Omega_{\mathcal{D}}, U_{(a,1)} \Omega_{\mathcal{D}} \rangle \rangle ,
\end{aligned}
$$

also $\langle \Omega_{\mathcal{D}}, U_{(a,1)} \Omega_{\mathcal{D}} \rangle \geq 1 - 2\epsilon$ für alle $a \in \mathbb{R}^D$. Das ist aber im Widerspruch zu [WD5]. Ist $a \cdot \tilde{a} < 0$, so folgt mit $\Omega_{\mathcal{D}} = [\underline{f}]$ und [WD2]

$$
\begin{aligned}
&\lim_{t \to \infty} \langle \Omega_{\mathcal{D}}, U_{(a,1)} \Omega_{\mathcal{D}} \rangle \\
&= \lim_{t \to \infty} \sum_{M,N=0}^{\infty} \int_{\mathbb{R}^{(N+M)D}} d(x_1, \dots, x_N, y_1, \dots, y_M) \mathcal{W}_{N+M}(x_1, \dots, x_N, y_1, \dots, y_M) \\
&\qquad\qquad \times \overline{f^{(N)}(x_N, \dots, x_1)} f^{(M)}(y_1 - a, \dots, y_M - a) \\
&= \sum_{M,N=0}^{\infty} \int_{\mathbb{R}^{(N+M)D}} d(x_1, \dots, x_N, y_1, \dots, y_M) \mathcal{W}_N(x_1, \dots, x_N) \mathcal{W}_M(y_1, \dots, y_M) \\
&\qquad\qquad \times \overline{f^{(N)}(x_N, \dots, x_1)} f^{(M)}(y_1, \dots, y_M) \\
&= \langle \Omega_{\mathcal{D}}, \Omega \rangle \langle \Omega, \Omega_{\mathcal{D}} \rangle = |\langle \Omega_{\mathcal{D}} - \Omega', \Omega \rangle|^2 < \epsilon^2 ,
\end{aligned}
$$

Widerspruch.

Die Eindeutigkeit dieser Konstruktion (bis auf unitäre Äquivalenz) wird in Streater-Wightman, Thm 3-7, gezeigt. □

10 Analytische Fortsetzung der Wightman-Funktionen

Zunächst einige motivierende Vorbemerkungen. Falls die Fourier-Transformierte $\hat{f} \in \mathcal{C}(\mathbb{R})$ ihren Träger nur in $\mathbb{R}^+$ hat, so hat die ursprüngliche Funktion $f =$

$\frac{1}{\sqrt{2\pi}}\int_0^\infty dp\, e^{-\mathrm{i}px}\hat{f}(p)$ eine Fortsetzung zu $x \mapsto x - \mathrm{i}y$ mit $y \geq 0$, also in die untere Halbebene. Die fortgesetzte Funktion ist hier die Laplace-Transformation von $\hat{f}$,

$$f(x - \mathrm{i}y) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_0^\infty dp\, e^{-p(y+\mathrm{i}x)}\hat{f}(p)\ ,$$

welche in einem Halbraum $\mathrm{Re}(y) > s_0$ *holomorph* ist. Im allgemeinen bestimmt sich s_0 durch exponentielle Schranken an $\hat{f}(p)$; für beschränkte $\hat{f}$ ist $s_0 = 0$. In diesem Sinn ist $f(x)$ *Randwert einer holomorphen Funktion.* Während $f(x - \mathrm{i}y)$ für $y > 0$ insbesondere beliebig oft differenzierbar ist, muß das für die Randwerte nicht gelten. Z.B. ist $f(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}\int_0^\infty dp\, \frac{e^{-\mathrm{i}px}}{1+p^2}$ zwar überall stetig, aber in $x = 0$ nicht differenzierbar. Wir zeigen, daß solche Holomorphie-Eigenschaften richtig bleiben, wenn in D Dimensionen der Träger von $\hat{f}$ in einem Kegel liegt.

Holomorphie einer Funktion $f(z_1, \dots, z_n)$ in n komplexen Variablen $z_i \in \mathbb{C}$ im Punkt $(w_1, \dots, w_n) \in \mathbb{C}^n$ bedeutet zunächst Darstellbarkeit als absolut konvergente Potenzreihe

$$f(z_1, \dots, z_n) = \sum_{k_1,\dots,k_n=0}^{\infty} f_{k_1\dots,k_n}(z_1 - w_1)^{k_1} \cdots (z_n - w_n)^{k_n} \tag{10.1}$$

mit absoluter Konvergenz für $|z_i - w_i| < R_i$ und $R_i > 0$. Nach einem tiefen Theorem von Hartogs ist das äquivent zu *separater Holomorphie* in jeder Variable z_k bei *festen* z_j mit $j \neq k$. Somit haben in n Variablen holomorphe Funktionen eine Darstellung über die Cauchy-Formel

$$f(z_1, \dots, z_n) = \frac{1}{(2\pi\mathrm{i})^n} \int_{|z_i-\zeta_i|=r_i} \frac{d(\zeta_1, \dots \zeta_n)\; f(\zeta_1, \dots, \zeta_n)}{(\zeta_1 - z_1) \cdots (\zeta_n - z_n)}\ . \tag{10.2}$$

Aus dieser ergeben sich Schranken

$$\frac{1}{k_1! \cdots k_n!}\Big|\frac{(\partial^{k_1+\dots+k_n} f)(z_1, \dots, z_n)}{\partial z_1^{k_1} \cdots \partial z_n^{k_n}}\Big| \leq \frac{C}{r_1^{k_1} \cdots r_n^{k_n}}$$

für die Ableitungen.

Liegen $q = (q^+, \vec{q}),\ \ y)(y^0, \vec{y}) \in \mathbb{R}^D$ im Vorwärtslichtkegel $\overline{V_+}$, davon y tatsächlich im Inneren V_+,

$$q^0 > 0\ ,\ \|\vec{q}\|^2 \leq (q^0)^2 \quad \text{und} \quad y^0 > 0\ ,\ \|\vec{y}\|^2 < (y^0)^2\ ,$$

dann folgt für festes $y \in V_+$

$$\left.\begin{matrix} q \cdot y \\ q \cdot \tilde{y} \end{matrix}\right\} = q^0 y^0 \pm \langle \vec{q}, \vec{y} \rangle \geq q^0 y^0 - \|\vec{q}\|\|\vec{y}\| \geq q^0(y^0 - \|y\|) = \sqrt{2} q^0 \operatorname{dist}(y, \partial V_+)\ .$$

Sei zunächst $\hat{f}(q_1, \dots, q_N)$ eine stetige und in q_j^0 polynomial beschränkte Funktion, die in jedem der $q_j \in \mathbb{R}^D$ ihren Träger in $\overline{V_+}$ hat. Ist $z_i = x_i - \mathrm{i}y_i$ mit $x_i \in \mathbb{R}^D$

beliebig und $y_i \in V_+$, so sichert der exponentielle Dämpfungsfaktor in q_j^0 (die $\vec{q}_j$-Integrale erstrecken sich für festes q_0 über einen kompakten Ball), daß

$$f(z_1, \ldots, z_N) = \frac{1}{(2\pi)^{\frac{ND}{2}}} \int_{\overline{V_+}^N} d(q_1, \ldots, q_N)\; e^{-\mathrm{i}\sum_{j=1}^N (x-\mathrm{i}y)\cdot\tilde{q}_j} \hat{f}(q_1, \ldots, q_N) \tag{10.3}$$

und ihre partiellen Ableitungen konvergieren. Aus der Gültigkeit der Cauchy-Riemannschen Differentialgleichungen folgt, daß $f(z_1, \ldots, z_N)$ in der sogenannten *Vorwärtsröhre* (da translationsinvariant im Realteil)

$$\mathcal{T}_N := \{(z_1, \ldots, z_N) \in \mathbb{C}^{ND}\;,\;\; z_i \in \mathbb{R}^D - \mathrm{i}V_+\} \tag{10.4}$$

zunächst getrennt-holomorph und nach dem Theorem von Hartogs auch gleichzeitig holomorph in allen Variablen ist. Nach dem Satz von der dominierten Konvergenz gilt außerdem

$$f(x_1, \ldots, x_N) = \lim_{y_0 \to 0} f(z_1, \ldots, z_N)\;.$$

In diesem Sinn ist $f(x_1, \ldots, x_N)$ Randwert einer holomorphen Funktion. Nach einem technischen Theorem, dessen Kern das Lemma von Bros-Epstein-Glaser ist, überträgt sich alles auf Distributionen:

Theorem 10.1 *Sei $T \in (\mathcal{S}(\mathbb{R}^{ND})'$ eine temperierte Distribution, so daß die Fourier-Transformierte (bei Vorzeichenkonvention wie in (8.5)) ihren Träger in $(\overline{V_+})^N$ hat. Dann gibt es eine in der Vorwärtsröhre $\mathcal{T}_N$ holomorphe, eindeutig bestimmte Funktion F derart, daß*

$$\begin{aligned} &T(f_1, \ldots, f_N) \\ &= \lim_{V_+ \ni y_i \to 0} \int_{\mathbb{R}^{ND}} d(x_1, \ldots, x_N)\; F(x_1 - \mathrm{i}y_1, \ldots, x_N - \mathrm{i}y_N) f_1(x_1) \cdots f_N(x_N)\;. \end{aligned} \tag{10.5}$$

Dabei konvergieren die y_i von innerhalb des Lichtkegels gegen die Spitze 0. Diese Funktion ist gegeben durch

$$F(z_1, \ldots, z_N) = \frac{1}{(2\pi)^{\frac{ND}{2}}} \int_{(\overline{V_+})^N} d(q_1, \ldots, q_N) e^{-\mathrm{i}\sum_{j=1}^N z_j\cdot\tilde{q}_j} \hat{T}(q_1, \ldots, q_N) \tag{10.6}$$

und genügt einer Abschätzung

$$|F(z_1, \ldots, z_N)| \leq |P(\{z_j\})| \prod_{j=1}^N (1 + (\mathrm{dist}(y_j, \partial V_+))^{-K})$$

für ein Polynom P und ein $K \in \mathbb{N}$.

Ist umgekehrt $F : \mathbb{C}^{ND} \to \mathbb{C}$ holomorph in $\mathcal{T}_N$, und für jedes fest gewählte $(\eta_1, \ldots, \eta_N) \in (V_+)^N$ gelte

i) $|F(x_1 - \mathrm{i}t\eta_1, \dots, x_N - \mathrm{i}t\eta_N)| \leq Q_{\eta_1,\dots,\eta_N}(\{x_j\}) \cdot \frac{1}{t^K}$ *für alle* $0 < t \leq 1$ *sowie ein Polynom* $Q_{\eta_1,\dots,\eta_N}$ *und ein* $K = K_{\eta_1,\dots,\eta_N} \in \mathbb{N}$,

ii) $|F(x_1 - \mathrm{i}y_1, \dots, x_N - \mathrm{i}y_N)| \leq P_{\eta_1,\dots,\eta_N}(\{x_j, y_j\})$ *für* $y_j \in \eta_j + V_+$ *und ein Polynom* $P_{\eta_1,\dots,\eta_N}$.

Dann definiert (10.5) eine temperierte Distribution $T \in (\mathcal{S}(\mathbb{R}^{ND}))'$*, deren Fourier-Transformierte* $\hat{T}$ *ihren Träger in* $(\overline{V_+})^N$ *hat.*

Beweis. Siehe Reed-Simon, Bd II, Thm IX.15 und Thm IX.16 (insgesamt 6 Seiten!). □

Aus der Spektrumsbedingung [WD2] in Satz 8.2 folgt sofort:

Folgerung 10.2 *Die reduzierte Wightman-Distribution* $W_N(\xi_1, \dots, \xi_{N-1})$ *ist Randwert im Sinne von (10.5) einer eindeutig bestimmten, in der Vorwärtsröhre* $\mathcal{T}_{N-1}$ *holomorphen Funktion*

$$\begin{aligned} &W_N(\xi_1 - \mathrm{i}\eta_1, \dots, \xi_{N-1} - \mathrm{i}\eta_{N-1}) \\ &= \frac{1}{(2\pi)^{\frac{(N-1)D}{2}}} \int_{(\overline{V_+})^{N-1}} d(q_1, \dots, q_{N-1}) e^{-\mathrm{i}\sum_{j=1}^{N-1}(\xi_j - \mathrm{i}\eta_j)\cdot\tilde{q}_j} \widehat{W_N}(q_1, \dots, q_{N-1}) \end{aligned} \tag{10.7}$$

mit $\xi_j \in \mathbb{R}^D$ *und* $\eta_j \in V_+$*. Für* $W_N(\xi_1 - \mathrm{i}\eta_1, \dots, \xi_{N-1} - \mathrm{i}\eta_{N-1})$ *gilt eine Abschätzung wie in Theorem 10.1.* □

Insgesamt konnten wir damit ein kompliziertes Problem für unbeschränkte und zu mittelnde Operatoren im Hilbert-Raum auf die beste Funktionsklasse (holomorphe Funktionen) zurückführen! Selbst für das freie Feld ist die Darstellbarkeit der Korrelationsfunktionen als Grenzwerte aus dem Komplexen, sogenannte $\mathrm{i}\epsilon$-Vorschriften, von großer praktischer Bedeutung. Sie überträgt sich insbesondere auf die Störungstheorie.

Tatsächlich stellt sich das Holomorphiegebiet der Wightman-Funktionen als noch größer heraus. Da Lorentz-Transformationen den Vorwärtslichtkegel erhalten, $\Lambda V_+ \subseteq V_+$ für alle $\Lambda \in SO_+^\uparrow(1, D-1)$, folgt aus (10.7) in Kombination mit (8.5), daß

$$W_N(\zeta_1, \dots, \zeta_{N-1}) = W_N(\Lambda\zeta_1, \dots, \Lambda\zeta_{N-1}) \quad \text{für alle } \Lambda \in SO_+^\uparrow(1, D-1)\;.$$

Dabei ist $\zeta_j = \xi_j - \mathrm{i}\eta_j$, $\xi_j \in \mathbb{R}^D$ und $\eta_j \in V_+$. Die Lorentz-Gruppe $SO_+^\uparrow(1, D-1)$ kann nun komplexifiziert werden:

$$SO_{\mathbb{C}}(1, D-1) = \{\Lambda_c \in GL(D) \;:\; \Lambda_c^T g \Lambda_c = g\;,\; \det \Lambda_c = 1\}\;. \tag{10.8}$$

Definiert man $\tilde{\Lambda} := g^{\frac{1}{2}} \Lambda_c g^{-\frac{1}{2}}$ (im Komplexen hat g eine Wurzel), so folgt $\tilde{\Lambda}^t \tilde{\Lambda} = 1$, d.h. $SO_{\mathbb{C}}(1, D-1) \simeq SO(D, \mathbb{C})$. Insbesondere ist $SO_{\mathbb{C}}(1, D-1)$ zusammenhängend und verbindet im Komplexen die beiden Zusammenhangskomponenten $SO_+^\uparrow(1, D-1)$ und $SO_+^\downarrow(1, D-1)$. Solche Transformationen $\Lambda_c \in$

$SO_{\mathbb{C}}(1,D-1)$ führen nun aus $\mathcal{T}_{N-1}$ heraus, können aber andererseits genutzt werden, um W_N in solchen Punkten *zu definieren.* Dabei besteht die prinzipielle Gefahr, daß diese Konstruktion in einem Punkt $(w_1,\dots,w_{N-1}) \in \mathbb{C}^{N-1}$, der sich auf zwei verschiedene Arten $w_j = \Lambda_{c,1}\zeta_{j,1} = \Lambda_{c,2}\zeta_{j,2}$ aus $(\{\zeta_{j,1}\}),(\{\zeta_{j,2}\}) \in \mathcal{T}_{N-1}$ ergibt, zu verschiedenen Werten für $W_N(w_1,\dots,w_{N-1})$ führt. Nach einem Theorem von Bargmann-Hall-Wightman ist das aber nicht der Fall:

Theorem 10.3 (Bargmann-Hall-Wightman) *Es sei*

$$\begin{aligned}\mathcal{T}^e_{N-1} := \big\{(w_1,\dots,w_{N-1} \in \mathbb{C}^{(N-1)D} \ : \\ \exists\zeta_j \in \mathbb{R}^D - \mathrm{i}V_+ \ \textit{und}\ \Lambda^c \in SO_{\mathbb{C}}(1,D-1)\ \textit{mit}\ w_j = \Lambda^c\zeta_j\big\}\end{aligned} \tag{10.9}$$

die erweiterte Vorwärtsröhre. Dann wird durch

$$W_N(w_1,\dots,w_{N-1}) := W_N(\Lambda_c^{-1}w_1,\dots,\Lambda_c^{-1}w_{N-1})\ ,\quad (w_1,\dots,w_{N-1}) \in \mathcal{T}^e_{N-1}$$

für ein $\Lambda_c \in SO_{\mathbb{C}}(1,D-1)$ mit $\Lambda_c^{-1}w_j \in \mathbb{R}^D - \mathrm{i}V_+$ für alle $j = 1,\dots,N-1$, eine eindeutige holomorphe Fortsetzung der Wightman-Distributionen nach $\mathcal{T}^e_{N-1}$ definiert.

Beweis. Siehe Streater-Wightman, Thm 2-11 und das Lemma davor. □

Eine weitere Fortsetzung wird durch die Lokalität [WD3] erhalten. Zunächst definieren wir für eine Permutation $\pi \in \mathcal{S}_N$

$$\mathcal{W}^\pi_N(x_1,\dots,x_N) := \mathcal{W}_N(x_{\pi(1)},\dots,x_{\pi(N)})\ . \tag{10.10}$$

Daraus gewinnt man eine reduzierte Wightman-Funktion

$$W^\pi_N(\xi_1,\dots,\xi_{N-1}) := \mathcal{W}_N(0, x_{\pi(2)} - x_{\pi(1)},\dots,x_{\pi(N)} - x_{\pi(1)})\big|_{x_j - x_{j+1} = \xi_j}\ . \tag{10.11}$$

Ist $\pi = \pi_{j,j+1}$ die Transposition $\pi(j) = j+1, \pi(j+1) = j$ und ansonsten $\pi(k) = k$, so ergibt sich beispielsweise

$$W^{\pi_{j,j+1}}_N(\xi_1,\dots,\xi_{N-1}) = W_N(\xi_1,\dots,\xi_{j-2},\xi_j+\xi_{j-1},-\xi_j,\xi_j+\xi_{j+1},\xi_{j+2},\dots,\xi_{N-1}).$$

Durch holomorphe Fortsetzung der rechten Seite ist $W^{\pi_{j,j+1}}_N$ in den Punkten

$$W^{\pi_{j,j+1}}_N(\dots,\xi_{j-1} - \mathrm{i}(\eta_{j-1}+\eta_j),\ \xi_j + \mathrm{i}\eta_j,\ \xi_{j+1} - \mathrm{i}(\eta_{j+1}+\eta_j),\dots)$$

definiert, wobei $\xi_k - \mathrm{i}\eta_k$ steht für $k \notin \{j-1, j, j-1\}$ und $\eta_l \in \mathbb{R}_+$ für alle l. Man beachte das andere Vorzeichen in der j-ten Komponente! Allgemein folgt aus (10.11), daß W^π_N in allen Punkten $(z_1,\dots,z_{N-1})$ definiert ist, für die $(\zeta_1,\dots,\zeta_{N-1}) \in \mathcal{T}^e_{N-1}$ ist mit

$$\zeta_j := \begin{cases} z_{\pi(j)} + z_{\pi(j)+1} + \dots + z_{\pi(j+1)-1} & \text{für } \pi(j) < \pi(j+1) \\ -z_{\pi(j+1)} - z_{\pi(j+1)+1} - \dots - z_{\pi(j)-1} & \text{für } \pi(j) > \pi(j+1) \end{cases}$$

Wir scheiben nun $(z_1,\ldots,z_{N-1}) = \pi\circ(\zeta_1,\ldots,\zeta_{N-1}) \in \pi\circ\mathcal{T}_N^e$ für diese Zuordnung und nennen

$$\mathcal{T}_{N-1}^{e,\pi} := \bigcup_{\pi\in\mathcal{S}_{N-1}} \pi\circ\mathcal{T}_{N-1}^e$$

die *permutierte erweiterte Vorwärtsröhre.*

Wir zeigen nun, daß W_N sogar auf $\mathcal{T}_{N-1}^{e,\pi}$ holomorph ist. Die Vorwärtsröhre $\mathcal{T}_N$ enthält keine reellen Punkte. Dagegen enthält die Erweiterung $\mathcal{T}_N^e$ sehr viele reelle Punkte, die *Jost-Punkte* genannt werden. Wir überzeugen uns davon für $N=1$. Ist $w=\Lambda_c\zeta$ mit $\zeta=\xi-\mathrm{i}\eta\in\mathcal{T}_1$, dann $w\cdot\tilde{w}=\zeta\cdot\tilde{\zeta}=\xi\cdot\tilde{\xi}-\eta\cdot\tilde{\eta}-2\mathrm{i}\xi\cdot\tilde{\eta}$. Damit ist notwendig für $w\in\mathbb{R}^D$ daß $\xi\perp\tilde{\eta}$. Nach (reeller) Lorentz-Transformation können wir $\tilde{\eta}=(1,\vec{0})$ annehmen, somit ist ξ raumartig und deshalb $w\cdot\tilde{w}<0$. Tatsächlich wird jeder solche Punkt erhalten: Nach räumlicher Rotation kann $w=(w_0,w_1,0,\ldots,0)$ angenommen werden mit $w_1>|w_0|$. Es genügt deshalb, $D=2$ zu betrachten. Dann ist

$$\begin{pmatrix} w^0 \\ w^1 \end{pmatrix} = \underbrace{\begin{pmatrix} \cos\alpha & \mathrm{i}\sin\alpha \\ \mathrm{i}\sin\alpha & \cos\alpha \end{pmatrix}}_{\det(\ )=1} \cdot \underbrace{\begin{pmatrix} w^0\cos\alpha - \mathrm{i}w^1\sin\alpha \\ w^1\cos\alpha - \mathrm{i}w^0\sin\alpha \end{pmatrix}}_{\in\mathbb{R}^D-\mathrm{i}V_+}$$

Allgemein gilt:

Satz 10.4 (Jost) *$(w_1,\ldots,w_N)\in\mathcal{T}_N^e\cap\mathbb{R}^{ND}$ genau dann, wenn alle konvexen Linearkombinationen $w_{(\lambda)} := \sum_{j=1}^N \lambda_j w_j$ mit $\lambda_j\geq 0$ und $\sum_j\lambda_j=1$ raumartig sind, $w_{(\lambda)}\widetilde{w_{(\lambda)}}<0$.*

Beweis. Siehe Streater-Wightman, Thm 2.12. □

Aus der Lokalität folgt nun:

Theorem 10.5 *W_N^π und W_N definieren dieselbe holomorphe Fortsetzung und sind umgekehrt verschiedene Randwerte derselben in $\mathcal{T}_{N-1}^{e,\pi}$ holomorphen Funktion.*

Beweis. Ist $(x_1-x_2,\ldots,x_{N-1}-x_N)$ ein Jost-Punkt, so folgt $(x_j-x_k)\cdot\widetilde{(x_j-x_k)}<0$ für alle $j\neq k$. Wegen der Lokalität [WD3] gilt für jede Permutation $\pi\in\mathcal{S}_N$

$$\mathcal{W}_N(x_1,\ldots,x_N) = \mathcal{W}_N(x_{\pi(1)},\ldots,x_{\pi(N)}) \quad \text{für alle } x_j\in\mathbb{R}^D \text{ derart, daß } (x_1-x_2,\ldots,x_{N-1}-x_N) \text{ Jost-Punkt.}$$

Somit folgt $W_N(w_1,\ldots,w_{N-1}) = W_N^\pi(w_1,\ldots,w_{N-1})$ für jeden Jost-Punkt. Wegen Stetigkeit des Skalarprodukts wird in Satz 10.4 das Supremum angenommen, d.h. es gilt sogar $w_{(\lambda)}\cdot\widetilde{w_{(\lambda)}}\leq-\epsilon<0$ für alle $\lambda_j\geq 0$ mit $\sum_{j=1}^{N-1}\lambda_j=1$. Damit besteht auch eine reelle Umgebung von $(w_1,\ldots,w_{N-1})$ aus Jost-Punkten, und nach dem Identitätssatz für holomorphe Funktionen (etwas eleganter: Edge-of-the-wedge-Theorem, siehe Streater-Wightman) stimmen die holomorphen Fortsetzungen von

W_N und W_N^π auf ihrem gesamten Holomorhiegebiet überein, definieren also dieselbe holomorphe Funktion $W_N(z_1, \dots, z_{N-1})$ für $(z_1, \dots, z_{N-1}) \in \mathcal{T}^{e,\pi}_{N-1}$. □

Aus der Gültigkeit von $W_N(z_1, \dots, z_{N-1}) = W_N^\pi(z_1, \dots, z_{N-1})$ für alle $(z_1, \dots, z_{N-1}) \in \mathcal{T}^{e,\pi}_{N-1}$ folgt keinesfalls Gleichheit der Wightman-Distributionen $W_N(\xi_1, \dots, \xi_{N-1})$ und $W_N^\pi(\xi_1, \dots, \xi_{N-1})$ für alle $(\xi_1, \dots, \xi_{N-1}) \in \mathbb{R}^{(N-1)D}$! Für jede Permutation $\pi \neq 1$ haben die Imaginärteile von $(\zeta_1, \dots, \zeta_{N-1})$ und $\pi \circ (\zeta_1, \dots, \zeta_{N-1})$ zumindest in einer Komponente verschiedene Vorzeichen, so daß der Limes $V_+ \ni \eta_j \to 0$, der die Wightman-Distributionen liefert, von *verschiedenen* Seiten ausgeführt wird. Die reellen Kegel $\xi_j \in \overline{V_+}$ sind somit Verzweigungsschnitte auf dem Rand von $\mathcal{T}^{e,\pi}_{N-1}$.

Es gibt jedoch eine ausgezeichnete Permutation, die zu Gleichheit für die Distributionen führt, nämlich die vollständige Umkehr $W_N(\zeta_1, \dots, \zeta_{N-1}) = W_N(-\zeta_{N-1}, \dots, -\zeta_1)$. Ist D gerade, dann ist auch -1 eine komplexe Lorentz-Transformation, somit auch

$$W_N(\zeta_1, \dots, \zeta_{N-1}) = W_N(\zeta_{N-1}, \dots, \zeta_1) . \tag{10.12}$$

Der Limes $\eta_j \to 0$ von innerhalb des Kegels wirkt nun in gleicher Weise auf beide Permutationen und liefert die Gültigkeit von (10.12) *als Distribution* in allen $\xi_j \in \mathbb{R}^D$. Ausgedrückt durch $\mathcal{W}_N$ ist damit das *PCT-Theorem* bewiesen:

Theorem 10.6 *Sei D gerade. Für jede Familie von Wightman-Distributionen, die* [WD0]–[WD3] *erfüllt, gilt*

$$\mathcal{W}_N(x_1, \dots, x_N) = \mathcal{W}_N(-x_N, \dots, -x_1) \quad \textit{für alle } x_j \in \mathbb{R}^D .$$

Gilt zusätzlich [WD4]*, so daß eine Wightman-QFT $(\mathcal{H}, \mathcal{D}, \Phi, U, \Omega)$ rekonstruiert werden kann, dann gibt es einen anti-unitären Operator Θ auf $\mathcal{H}$ mit $\Theta\Phi(f)\Theta^{-1} = \Phi(\overline{Sf})$, wobei $\overline{Sf}(x) = \overline{f(-x)}$.*

Beweis. Nur die Aussage für den Feldoperator verbleibt zu zeigen; wir verweisen hier auf Streater-Wightman. □

11 Euklidische Quantenfeldtheorie

Es sei $\mathcal{E}^D := \{(\mathrm{i}z^0, \vec{z}) \in \mathbb{C}^D \;:\; z^0 \in \mathbb{R} \;,\; \vec{z} \in \mathbb{R}^{D-1}\}$ der reelle Vektorraum der *Euklidische Punkte.*

Lemma 11.1 *Die Teilmenge der komplexen Lorentz-Transformationen $SO_\mathbb{C}(1, D-1)$, welche $\mathcal{E}^D$ invariant lassen, besteht genau aus den Matrizen $\Lambda_c = g^{-\frac{1}{2}} R g^{\frac{1}{2}}$ mit R reell und $R^t R = 1$ und ist somit isomorph zur Gruppe $SO(D)$.*

Beweis. Nach den Bemerkungen im Anschluß an (10.8) besteht $SO_{\mathbb{C}}(1, D-1)$ aus Matrizen $\Lambda_c = g^{-\frac{1}{2}} R g^{\frac{1}{2}}$ mit $R^t R = 1$. Dabei wählen wir $g^{\frac{1}{2}} := \mathrm{diag}(1, \mathrm{i}, \ldots, \mathrm{i})$. Dann ist $\mathcal{E}^D = \mathrm{i} g^{-\frac{1}{2}} \mathbb{R}^D$ invariant unter $g^{-\frac{1}{2}} R g^{\frac{1}{2}}$ mit R reell. □

Ein Tupel $(z_1, \ldots, z_N) \in (\mathcal{E}^D)^N$ heißt *nichtzusammenfallend*, falls $z_j \neq z_k$ für alle $j \neq k$. Wir bezeichen mit $\mathcal{E}^{ND}_{\neq}$ die Menge der nichtzusammenfallenden Euklidischen Punkte in $(\mathcal{E}^D)^N$. Wir zeigen, daß die Differenzen im maximal fortgesetzten Holomorphiegebiet der Wightman-Funktionen liegen.

Satz 11.2 *Für jeden Punkt* $(z_1, \ldots, z_N) \in \mathcal{E}^{ND}_{\neq}$ *gilt* $(z_1 - z_2, \ldots, z_{N-1} - z_N) \in \mathcal{T}^{e,\pi}_{N-1}$.

Beweis. Sei $y_j := -\mathrm{i} g^{\frac{1}{2}} z_j \in \mathbb{R}^D$. Betrachte die $\frac{D(D-1)}{2}$ Einheitsvekoren $e_{kl} := \frac{y_k - y_l}{\|y_k - y_l\|}$ mit $k < l$ und der Euklidischen Norm. Der Orthogonalraum zu e_{kl} ist eine Hyperebene im $\mathbb{R}^D$. Somit ist die Menge der Vektoren, die orthogonal zu irgendeinem e_{kl} ist, Vereinigung von $\frac{D(D-1)}{2}$ Hyperebenen, insbesondere verschieden von $\mathbb{R}^D$. Es gibt folglich ein $e \in \mathbb{R}^D$ mit $\langle e, e_{kl} \rangle \neq 0$ für alle k, l. Somit sind alle $\langle e, y_j \rangle$ paarweise verschieden, und es gibt es eine eindeutig bestimmte Permutation π mit

$$\langle e, y_{\pi(1)} \rangle < \langle e, y_{\pi(2)} \rangle < \cdots < \langle e, y_{\pi(N)} \rangle \,.$$

Durch $SO(D)$-Rotation R erreichen wir $Re = (1, \vec{0})$ und deshalb $(Ry_{\pi(1)})^0 < (Ry_{\pi(2)})^0 < \cdots < (Ry_{\pi(N)})^0$. Setze nun $x_j := \mathrm{i} g^{-\frac{1}{2}} R y_j = g^{-\frac{1}{2}} R g^{\frac{1}{2}} z = \Lambda_c z_j$, dann gilt für die reduzierte Wightman-Funktion

$$W^\pi_N(\zeta_1, \ldots, \zeta_{N-1}) := \mathcal{W}_N(x_{\pi(1)}, \ldots x_{\pi(N)}) = \mathcal{W}_N(\Lambda_c z_{\pi(1)}, \ldots \Lambda_c z_{\pi(N)}) \,,$$

daß $(\zeta_1, \ldots, \zeta_{N-1}) \in \mathcal{T}_{N-1}$. Somit $(z_1 - z_2, \ldots, z_{N-1} - z_N) \in \mathcal{T}^{e,\pi}_{N-1}$. □

Es sei bemerkt, daß die Vorwärtsröhre $\mathcal{T}_{N-1}$ nur ein Vorzeichen realisiert und deshalb nicht alle Euklidischen Punkte erreicht.

Definition 11.3 Die auf $\mathbb{R}^{ND}_{\neq} := \{(y_1, \ldots, y_N) \in \mathbb{R}^{ND} \;:\; y_k \neq y_l \;\forall k, l\}$ definierte, reell-analytische Funktion

$$\mathcal{S}_N(y_1, \ldots, y_N) := \mathcal{W}_N(\mathrm{i} g^{-\frac{1}{2}} y_1, \ldots, \mathrm{i} g^{-\frac{1}{2}} y_N) \qquad (11.1)$$

heißt die zu $\mathcal{W}_N$ gehörige *Schwinger-Funktion.*

Wir stellen nun Eigenschaften der Schwinger-Funktionen zusammen und benötigen dazu einige Vorbetrachtungen.

Lemma 11.4 *Die Positivität* [WD4] *der Wightman-Distributionen schreibt sich im Impulsraum als*

$$
\begin{aligned}
&0 \leq \sum_{M,N=0}^{\infty} \int_{(\overline{V_+})^{M+N-1}} d(p_1,\dots,p_{N-1},r,q_1,\dots,q_{M-1}) \\
&\times \widehat{W_{N+M}}(p_{N-1},\dots,p_1,r,q_1,\dots,q_{M-1}) \overline{\widehat{f^{(N)}}(r;p_1,\dots,p_{N-1})}\, \widehat{f^{(M)}}(r;q_1,\dots,q_{M-1}) \\
&\textit{mit} \qquad\qquad\qquad\qquad\qquad\qquad\qquad\qquad\qquad\qquad\qquad\qquad\qquad\qquad (11.2) \\
&\widehat{f^{(M)}}(r;q_1,\dots,q_{M-1}) \\
&:= \int_{\mathbb{R}^D} dy_1 \int_{\mathbb{R}^{(M-1)D}} d(\eta_1,\dots,\eta_{M-1})\; f_{(y_1)}(\eta_1,\dots,\eta_{M-1}) e^{\mathrm{i}y_1\cdot\tilde{r}-\mathrm{i}\sum_{k=1}^{M-1}\eta_k\cdot\tilde{q}_k}\;. \qquad (11.3)
\end{aligned}
$$

Beweis. Nach $x_j \mapsto x_{N+1-j}$ lautet die Positivitätsbedingung [WD4]

$$
\begin{aligned}
0 &\leq \sum_{M,N=0}^{\infty} \int_{\mathbb{R}^{(N+M)D}} d(x_1,\dots,x_N,y_1,\dots,y_M) \\
&\quad \times \mathcal{W}_{N+M}(x_N,\dots,x_1,y_1,\dots,y_M)\overline{f^{(N)}(x_1,\dots,x_N)} f^{(M)}(y_1,\dots,y_1)\;.
\end{aligned}
$$

Ausgedrückt durch Differenzen $\xi_j = x_j - x_{j+1}$ und $\eta_k = y_k - y_{k+1}$ ergibt sich nach Translationsinvarianz, Übergang zu reduzierter Wightman-Distribution (8.7) und Fourier-Transformation (10.7)

$$
\begin{aligned}
&\mathcal{W}_{N+M}(x_N,\dots,x_1,y_1,\dots,y_M) \\
&= \mathcal{W}_{N+M}(0,x_{N-1}-x_N,\dots,x_1-x_N,y_1-x_N,\dots,y_M-x_N) \\
&= \mathcal{W}_{N+M}\big(0,\xi_{N-1},\dots,\xi_{N-1}+\dots+\xi_1,\xi_{N-1}+\dots+\xi_1+y_1-x_1, \\
&\qquad\qquad \xi_{N-1}+\dots+\xi_1+y_1-x_1-\eta_1,\dots,\xi_{N-1}+\dots+\xi_1+y_1-x_1-\eta_1-\dots-\eta_{M-1}\big) \\
&= W_{N+M}(-\xi_{N-1},\dots,-\xi_1,x_1-y_1,\eta_1,\dots,\eta_{M-1}) \\
&= \int_{(\overline{V_+})^{M+N-1}} d(p_1,\dots,p_{N-1},r,q_1,\dots,q_{M-1}) \\
&\quad \times \widehat{W_{N+M}}(p_{N-1},\dots,p_1,r,q_1,\dots,q_{M-1}) e^{\mathrm{i}\sum_{j=1}^{N}\xi_j\cdot\tilde{p}_j-\mathrm{i}(x_1-y_1)\cdot\tilde{r}-\mathrm{i}\sum_{k=1}^{M}\eta_k\cdot\tilde{q}_k}\;. \qquad (11.4)
\end{aligned}
$$

Unter Berücksichtigung von $f^{(M)}(y_1,\dots,y_1) = f^{(M)}_{(y_1)}(\eta_1,\dots,\eta_{N-1})$, siehe (8.7), folgt nun die Behauptung. $\square$

Im Gegensatz zu Wightman-Distributionen gibt es keinen Grund, sie gegen Testfunktionen zu integrieren. Mehr noch: die Nichtdefiniertheit der $\mathcal{S}_N$ an zusammenfallenden Punkten ist kritisch. Dennoch erfordert die Formulierung einer zentralen Eigenschaft den Übergang zum Schwinger-Funktional. Dazu betrachten wir folgende Untervektorräume der Borchers-Uhlmann-Algebra $\mathcal{A} = \bigoplus_{N=0}^{\infty} \mathcal{A}^N$:

$$\begin{aligned}
\mathcal{A}_0^N &:= \{f^{(N)} \in \mathcal{S}(\mathbb{R}^{ND}) \;:\; f^{(N)} = 0 \text{ mit allen Ableitungen auf } \mathbb{R}^{ND} \setminus \mathbb{R}^{ND}_{\neq}\},\\
\mathcal{A}_{0+}^N &:= \{f^{(N)} \in \mathcal{A}_0^N \;:\; \mathrm{supp}(f^{(N)}) \subseteq \{(y_1,\dots,y_N) \;:\; y_j^0 \geq 0 \;\forall j\}\},\\
\mathcal{A}_{<}^N &:= \{f^{(N)} \in \mathcal{S}(\mathbb{R}^{ND}) \;:\; \mathrm{supp}(f^{(N)}) \subseteq \{(y_1,\dots,y_N) \;:\; y_1^0 < y_2^0 < \dots < y_N^0\}\},\\
\mathcal{A}_{<+}^N &:= \{f^{(N)} \in \mathcal{S}(\mathbb{R}^{ND}) \;:\; \mathrm{supp}(f^{(N)}) \subseteq \{(y_1,\dots,y_N) \;:\; 0 < y_1^0 < y_2^0 < \dots < y_N^0\}\}.
\end{aligned}$$

Entsprechend sei $\mathcal{A}_\bullet = \bigoplus_{N=0}^{\infty} \mathcal{A}_\bullet^N$ mit $\bullet \in \{0, 0+, <, <+\}$ und $\mathcal{A}_\bullet^0 = \mathbb{C}$. Keiner dieser Vektorräume ist Unteralgebra. Definiert man jedoch die *Reflexion*

$$(\theta \underline{f})^{(N)}\big((y_1^0, \vec{y}_1), \dots, (y_N^0, \vec{y}_N)\big) := f^{(N)}\big((-y_1^0, \vec{y}_1), \dots, (-y_N^0, \vec{y}_N)\big) \tag{11.5}$$

an der Hyperebene $x^0 = 0$ und Involution $*$ und Produkt $\otimes$ wie zuvor, dann folgt

$$\begin{aligned}
\underline{f_1}, \underline{f_2} \in \mathcal{A}_{0+} \quad &\Rightarrow \quad (\Theta \underline{f_1})^* \otimes \underline{f_2} \in \mathcal{A}_0 \;,\\
\underline{f_1}, \underline{f_2} \in \mathcal{A}_{<+} \quad &\Rightarrow \quad (\Theta \underline{f_1})^* \otimes \underline{f_2} \in \mathcal{A}_< \;.
\end{aligned} \tag{11.6}$$

Nach diesen Vorbereitungen beweisen wir

Satz 11.5 *Es seien* $(\mathcal{W}_0, \mathcal{W}_1, \mathcal{W}_2, \dots)$ *Wightman-Distributionen mit Eigenschaften* [WD0]–[WD4] *aus Satz 8.2. Dann haben die zugehörigen Schwinger-Funktionen folgende Eigenschaften:*

[S0] *Regularität.* $\mathcal{S}_N(y_1, \dots, y_N) \leq P_N(\{y\})(1 + (\min_{k<l} \|y_k - y_l\|)^{-K})$ *für ein Polynom* P_N *und ein* $K \in \mathbb{N}$.

[S1] *Euklidische Invarianz.* $\mathcal{S}_N(Ry_1 + a, \dots, Ry_N + a) = \mathcal{S}_N(y_1, \dots, y_N)$ *für alle* $(a, R) \in \mathbb{R}^D \rtimes SO(D)$.

[S2] *Reflexionspositivität. Sei* $\underline{f} \in \mathcal{A}_0$. *Dann wird durch*

$$\mathcal{S}(\underline{f}) := f^{(0)} + \sum_{N=1}^{\infty} \int_{\mathbb{R}^{ND}_{\neq}} d(y_1, \dots, y_N) \mathcal{S}_N(y_1, \dots, y_N) f^{(N)}(y_1, \dots, y_N) \tag{11.7}$$

ein lineares stetiges Funktional auf $\mathcal{A}_0$ *definiert. Dieses erfüllt*

$$\mathcal{S}((\theta \underline{f})^* \otimes \underline{f}) \geq 0 \qquad \text{für alle } \underline{f} \in \mathcal{A}_{<+} \;. \tag{11.8}$$

[S3] *Symmetrie.* $\mathcal{S}_N(y_1, \dots, y_N) = \mathcal{S}_N(y_{\pi(1)}, \dots, y_{\pi(N)})$ *für jede Permutation* π.

Falls die Wightman-Distributionen die Clustering-Eigenschaft [WD5] *haben, gilt:*

[S4] *Clustering.*

$$\begin{aligned}
&\lim_{t\to\infty} \mathcal{S}_{N+M}(y_1, \dots, y_N, y_{N+1} + ta, \dots, y_{N+M} + ta)\\
&= \mathcal{S}_N(y_1, \dots, y_N) \mathcal{S}_M(y_{M+1}, \dots, y_{M+N}) \qquad \text{für alle } a \neq 0.
\end{aligned}$$

Beweis. [S1] ist klar.

[S0] Nach Übergang zu den Differenzen ist $|y_k^0 - y_l^0|$ in einer der Permutationen (bis auf einen Faktor $\sqrt{2}$) der Abstand zum Rand ∂V_+ des Vorwärtslichtkegels. Die Behauptung folgt dann aus Theorem 10.1 zusammen mit [S1], falls wir $|(Ry_k)^0 - (Ry_l)^0| \geq C\|y_k - y_l\|$ zeigen können für eine Rotation $R \in SO(D)$. Dazu äquivalent ist $|\langle e, y_k - y_l\rangle| \geq C\|y_k - y_l\|$ für ein $e \in \mathbb{R}^D$ mit $\|e\| = 1$, bzw. $|\langle e, e_{kl}\rangle| \geq C$ mit $e_{kl} := \frac{y_k - y_l}{\|y_k - y_l\|}$. Betrachte folgende Funktion auf $(S^D)^{\frac{N(N-1)}{2}}$:

$$f(\{e_{kl}\}) := \sup_{e \in S^D} \min_{k<l} |\langle e, e_{kl}\rangle| \,.$$

Nach der gleichen Überlegung wie in Satz 11.2 folgt: Für jedes feste $\{e_{kl}\}$ ist $f(\{e_{kl}\}) > 0$. Da $(S^D)^{\frac{N(N-1)}{2}}$ kompakt ist, gilt $f(\{e_{kl}\}) \geq C := \inf_{\{e_{kl}\}} f(\{e_{kl}\}) > 0$.

[S3] Nach Theorem 10.5 ist $W_N(z_1, \dots, z_N) = W_N(z_{\pi(1)}, \dots, z_{\pi(N)})$ für alle $\{z_j\}$ *im Inneren* des Holomorphiegebiets. Dieses enthält die Euklidischen Punkte.

[S2] Zunächst ist die Konvergenz des Integrals (11.7) zu zeigen. Da $f^{(N)}$ an zusammenfallenden Punkten mit allen Ableitungen verschwindet, liefert die Taylor-Formel mit Restglied

$$\begin{aligned} f^{(N)}(y_1, \dots, y_N) &= f^{(N)}(y_1, y_2, y_3, \dots, y_N) - f^{(N)}(y_2, y_2, y_3, \dots, y_N) \\ &= \sum_{|\alpha|=K} (\partial^\alpha_{y_1^\alpha} f^{(N)})(y_2 + \tau(y_1 - y_1), y_2, y_3, \dots, y_N)) \cdot (y_1 - y_2)^\alpha \end{aligned}$$

für ein $0 < \tau < 1$. Es folgt $|f^{(N)}(y_1, y_2, y_3, \dots, y_N)| \leq \|f\|'_K \min_{k<l} \|y_k - y_l\|^K$ für jedes $K \in \mathbb{N}$ und eine geeignete Halbnorm $\|f\|'_K$ auf $\mathcal{S}(\mathbb{R}^{ND})$. Verwendet man diese Abschätzung im Integral über $\|x_k - x_l\| < 1$ und ansonsten den schnellen Abfall im Unendlichen, so folgt die Konvergenz aus [S0].

Die Definitionen von $\theta, *, \otimes$ und Substitution $x_j \mapsto \theta x_{N+1-j}$ führen auf

$$\begin{aligned} S((\theta \underline{f})^* \otimes \underline{f}) = \sum_{N,M=0}^{\infty} \int_{\mathbb{R}^{N+M}} & d(x_1, \dots, x_N, y_1, \dots, y_M) \\ & \times \mathcal{S}_{N+M}(\theta x_N, \dots, \theta x_1, y_1, \dots, y_M) \overline{f^{(N)}(x_1, \dots, x_N)} f^{(M)}(y_1, \dots, y_M). \end{aligned} \tag{11.9}$$

Unter Beachtung von $\mathcal{S}_{N+M}(\ldots,y,\ldots) = \mathcal{W}_{N+M}(\ldots,\mathrm{i}g^{-\frac{1}{2}}y,\ldots)$ erhalten wir mit (11.4) (die Lage im Holomorphiebereich wird anschließend diskutiert):

$$\begin{aligned}
&\mathcal{S}_{N+M}(\theta x_N,\ldots,\theta x_1,y_1,\ldots,y_M)\\
&= \int_{(\overline{V_+})^{M+N-1}} d(p_1,\ldots,p_{N-1},r,q_1,\ldots,q_{M-1})\; \widehat{W_{N+M}}(p_{N-1},\ldots,p_1,r,q_1,\ldots,q_{M-1})\\
&\times \exp\Big(-\sum_{j=1}^{N}(g^{-\frac{1}{2}}\theta\xi_j)\cdot\widetilde{p_j} + (g^{-\frac{1}{2}}(\theta x_1 - y_1))\cdot\tilde{r} + \sum_{k=1}^{M}(g^{-\frac{1}{2}}\eta_k)\cdot\widetilde{q_k}\Big)\\
&= \int_{(\overline{V_+})^{M+N-1}} d(p_1,\ldots,p_{N-1},r,q_1,\ldots,q_{M-1})\; \widehat{W_{N+M}}(p_{N-1},\ldots,p_1,r,q_1,\ldots,q_{M-1})\\
&\times \exp\Big(\sum_{j=1}^{N}(\xi_j^0 p_j^0 - \mathrm{i}\vec{x}_j\vec{p}_j) - (x_1^0+y_1^0)r^0 + \mathrm{i}(\vec{x}_1-\vec{y}_1)\vec{r} + \sum_{k=1}^{M}(\eta_k^0 q^0 + \mathrm{i}\vec{\eta}_k\vec{q}_k)\Big)\,.
\end{aligned} \tag{11.10}$$

Wählen wir nun $\underline{f} \in \mathcal{A}_{<+}$, dann haben $f^{(N)}(x_1,\ldots,x_M) = f^{(N)}_{(x_1)}(\xi_1,\ldots,\xi_{N-1})$ $f^{(M)}(y_1,\ldots,y_M) = f^{(M)}_{(y_1)}(\eta_1,\ldots,\eta_{M-1})$ den Träger in $x_1, y_1 > 0$ und $\xi_j,\eta_k < 0$. Somit liegt $(\theta x_N,\ldots,\theta x_1,y_1,\ldots,y_M)$ in der Vorwärtsröhre und das Integral in (11.10) konvergiert. Sei nun

$$\begin{aligned}
&\check{f}^{(M)}(r;q_1,\ldots,q_{M-1})\\
&:= \int_{\mathbb{R}^{ND}} d(y_1,\ldots,y_M)\; f_{(y_1)}(\eta_1,\ldots,\eta_{N-1})e^{-y_1^0 r^0 - \mathrm{i}\vec{r}\vec{y}_1}e^{\sum_{k=1}^{M-1}(\eta_k^0 q_k^0 + \mathrm{i}\vec{\eta}_k\vec{q}_k)}\,.
\end{aligned} \tag{11.11}$$

Dann liefert Einsetzen von (11.10) in (11.9) unter Verwendung von (11.11)

$$\begin{aligned}
&S((\theta\underline{f})^*\otimes\underline{f})\\
&= \int_{(\overline{V_+})^{M+N-1}} d(p_1,\ldots,p_{N-1},r,q_1,\ldots,q_{M-1})\; \widehat{W_{N+M}}(p_{N-1},\ldots,p_1,r,q_1,\ldots,q_{M-1})\\
&\qquad\times \overline{\check{f}^{(N)}(r;p_1,\ldots,p_{N-1})}\,\check{f}^{(M)}(r;q_1,\ldots,q_{M-1})\,.
\end{aligned} \tag{11.12}$$

Da es unerheblich ist, ob $\widehat{W_{N+M}}(p_{N-1},\ldots,p_1,r,q_1,\ldots,q_{M-1})$ gegen Testfunktionen $\overline{\widehat{f^{(N)}}}, \widehat{f^{(M)}}$ oder $\overline{\check{f}^{(N)}}, \check{f}^{(M)}$ integriert wird, folgt $S((\theta\underline{f})^*\otimes\underline{f}) \geq 0$ für alle $\underline{f}\in\mathcal{A}_{<+}$ aus der Positivität (11.2) in Impulsraumdarstellung.

[S4] Nach $SO(D)$-Rotation kann $a = (0,\|a\|,0,\ldots,0)$ angenommen werden, was in der Wightman-Funktion einer Verschiebung um einen raumartigen Vektor entspricht. □

Einige Bemerkungen:

- Die Reflexionspositivität [S2] führt auf die allgemeinere Eigenschaft $\mathcal{S}((\theta\underline{f})^* \otimes \underline{f}) \geq 0$ für alle $\underline{f} \in \mathcal{A}_{0+}$. Dazu ist $f^{(N)}$ in Linearkombinationen zu zerlegen, die nach Rotation wie in Satz 11.2 geordnete Zeiten haben. Eine geeignete Permutation reduziert dann das Problem auf $\underline{f} \in \mathcal{A}_{<+}$.
- Man kann in Analogie zu Lemma 11.4 die Hermitizität

$$\overline{\widehat{W_N}(q_1, \dots, q_{N-1})} = \widehat{W_N}(q_{N-1}, \dots, q_1)$$

der Fourier-transformierten Wightman-Distributionen zeigen, aus der sich

$$\overline{\mathcal{S}(y_1, \dots, y_N)} = \mathcal{S}(\theta y_1, \dots, \theta y_N) \tag{11.13}$$

ergibt.

Wir geben nun ohne Beweis das fundamentale Theorem von Osterwalder-Schrader (1973–75) an:

Theorem 11.6 *Gegeben sei eine Familie $\mathcal{S} = (1, \mathcal{S}_1, \mathcal{S}_2, \dots)$ reell-analytischer Funktionen auf nichtzusammenfallenden Punkten, die die Eigenschaften* [S1]–[S3] *aus Satz 11.5 erfüllen. Die Eigenschaft* [S0] *sei in stärkerer Form realisiert:*

[S0'] *Es gibt eine Halbnorm $\|\ \|'$ auf $\mathcal{S}(\mathbb{R}^D)$, ein $C > 0$ und ein $K \in \mathbb{N}$ derart, daß für alle $f_j \in \mathcal{S}(\mathbb{R}^D)$ gilt*

$$|S_N(f_1 \otimes \cdots \otimes f_N)| \leq C(N!)^K \prod_{j=1}^{N} \|f_j\|' \,. \tag{11.14}$$

Dann gibt es eine eindeutig bestimmte Familie von Wightman-Distributionen $\mathcal{W} = (1, \mathcal{W}_1, \mathcal{W}_2, \dots)$, die die Eigenschaften [WD0]–[WD4] *aus Satz 8.2 haben und für die die zugehörigen Schwinger-Funktionen genau die $\mathcal{S}_N$ sind. Erfüllen die $\mathcal{S}_N$ zusätzlich Clustering* [S4], *so gilt Clustering* [WD5] *auch für die $\mathcal{W}_N$.*

Einige Anmerkungen:

- Eigenschaft [S0] sichert, daß $f^{(N)} \mapsto \mathcal{S}_N(f^{(N)})$ ein lineares stetiges Funktional auf $\mathcal{A}_0^N$ wird. In der ersten Arbeit von Osterwalder-Schrader fand sich deshalb die Forderung, daß $\mathcal{S}$ temperierte Distribution ist. Damit ließ sich zeigen, daß $\mathcal{S}_N$ *in jeder Variablen separat* eine Laplace-Transformation ist; benötigt wird aber Darstellbarkeit als *gemeinsame* Laplace-Transformation. Die neue Bedingung [S0'] ist dazu hinreichend, sie ist aber viel stärker als die Forderungen an $\mathcal{W}_N$.
- Die Symmetrie [S3] impliziert, daß Schwinger-Funktionen Korrelationsfunktionen *kommutierender* (also klassischer) Variablen sind. Die Momente eines beliebigen klassischen Wahrscheinlichkeitsmaßes sind damit Kandidaten für Schwinger-Funktionen. Das Osterwalder-Schrader-Theorem weist damit auf eine tiefliegende Äquivalenz von Statistischer Physik und Quantenfeldtheorie hin.

- Da auch die Euklidische Invarianz automatisch ist, verbleibt (neben Wachstumsschranken (11.14)) die *Reflexionspositivität* [S2] *als einzige nichttriviale Bedingung*. Es ist höchst bemerkenswert, daß diese Positivität, die zunächst nur die Wightman-Positivität [WD4] zu beschreiben scheint, auch die Spektrumsbedingung [WD2] liefert!

Es bietet sich nun an, einen maßtheoretischen Zugang zur Quantenfeldtheorie zu entwickeln und die Reflexionspositivität für wichtige Beispiele zu beweisen. Dieser Weg wird in Glimm-Jaffe eingeschlagen. Wir ziehen es vor, einen großen Schritt rückwärts zu gehen und zunächst Grundlagen und Modelle der Statistischen Physik auszuarbeiten.

Teil II
Modelle der Statistischen Physik

12 Überblick

In diesem Teil sehen wir uns Teilaspekte der Statistische Physik an, die später für die Formulierung von Modellen für Euklidische Quantenfeldtheorien wichtig werden. Neben exakt lösbaren Beispielen geht es uns vor allem um Singularitäten, die aus der unendlichen Zahl von Freiheitsgraden resultieren, und ihre Behandlung. Eine Klasse solcher Singularitäten sind Phasenübergänge. Die zum Studium von Phasenübergängen entwickelten Methoden haben sich auch in der Quantenfeldtheorie als äußerst nützlich erwiesen. Wir geben keine axiomatische Beschreibung der Statistischen Physik, sondern starten mit dem Unterraum des Fockraums zu fester Teilchenzahl sowie dem Postulat der Entropie.

Seien $\psi^{(i)}$ Eigenzustände des Einteilchen-Hamilton-Operators H mit Eigenwerten $H\psi^{(i)} = E^{(i)}\psi^{(i)}$. Wir betrachten im $\mathcal{N}$-Teilchen Unterraum $\mathcal{F}_\mathcal{N}$ des Fockraums jenen Zustand $\psi = (\mathcal{N}_1, \mathcal{N}_2, \dots)$, in dem sich $\mathcal{N}_i$ Teilchen im Einteilchenzustand $\psi^{(i)}$ befinden. Noch offensichtlicher Fortsetzung von H auf $\mathcal{F}_\mathcal{N}$ ist $H\psi = U\psi$ mit der Gesamtenergie $U = \sum_i \mathcal{N}_i E^{(i)}$. Bei Temperatur $T = 0$ wird der Zustand mit niedrigster Gesamtenergie angenommen, d.h. $(\mathcal{N}_1, \mathcal{N}_2, \dots)$ bestimmt sich (bei Entartung nicht eindeutig) aus der Forderung $U = \sum_i \mathcal{N}_i E^{(i)}$ minimal bei Nebenbedingung zumindest $\sum_i \mathcal{N}_i = \mathcal{N}$ und bei Fermionen zusätzlich $\mathcal{N}_i \in \{0, 1\}$.

Bei Temperatur $T > 0$ kommt ein gegenläufiger Effekt ins Spiel, der die *Entropie* maximiert. Die Entropie ist definiert als Logarithmus der Zahl der ununterscheidbaren Mikrozustände zur Konfiguration ψ:

$$S = \ln \frac{\mathcal{N}!}{\mathcal{N}_1!\mathcal{N}_2! \cdots} \tag{12.1}$$

(Wir setzen die Boltzmann-Konstante gleich 1, d.h. die Temperatur hat die Einheit der Energie). Für große $\mathcal{N}_i$ führt die Stirlingsche Formel $\ln n! \approx n \ln n - n$ auf

$$S \approx \mathcal{N} \ln \mathcal{N} - \sum_i \mathcal{N}_i \ln \mathcal{N}_i = -\sum_i \mathcal{N}_i \ln \frac{\mathcal{N}_i}{\mathcal{N}} \,. \tag{12.2}$$

Die Temperatur T ist nun das relative Gewicht zwischen den zu minimierenden Größen Energie und negative Entropie:

$$F := U - TS = \sum_i \mathcal{N}_i \Big(E^{(i)} + T \ln \frac{\mathcal{N}_i}{\mathcal{N}}\Big) \longrightarrow \min \,, \qquad \sum_i \mathcal{N}_i = \mathcal{N} \,. \tag{12.3}$$

Für endliche Summen ist das ein Standardproblem zur Bestimmung von Extrema mit Nebenbedingungen und führt auf $\frac{\partial F}{\partial \mathcal{N}_i} = \lambda = \text{const}$ mit Lösung $\frac{\mathcal{N}_i}{\mathcal{N}} = e^{\frac{\lambda - E^{(i)}}{T} - 1}$, wobei sich der Lagrange-Multiplikator λ aus der Nebenbedingung $\sum_i \mathcal{N}_i = \mathcal{N}$ ergibt:

$$\mathcal{N}_i = \frac{\mathcal{N}}{\mathcal{Z}} e^{-\frac{E^{(i)}}{T}} \;, \qquad \mathcal{Z} := \sum_i e^{-\frac{E^{(i)}}{T}} \;. \tag{12.4}$$

Der dabei auftretende Normierungsfaktor $\mathcal{Z}$ heißt *Zustandssumme*, und F in (12.3) heißt *Freie Energie*. Aus der Zustandssumme (bzw. dessen Logarithmus) können alle thermodynamischen Größen erhalten werden:

$$\begin{aligned} &U = \mathcal{N} T^2 \frac{\partial \ln \mathcal{Z}}{\partial T} = F - T \frac{\partial F}{\partial T} \;, \qquad S = \frac{U}{T} + \mathcal{N} \ln \mathcal{Z} = -\frac{\partial F}{\partial T} \;, \\ &F = -\mathcal{N} T \ln \mathcal{Z} \;. \end{aligned} \tag{12.5}$$

Eine weitere thermodynamische Größe ist die spezifische Wärme

$$c = \frac{\partial U}{\partial T} = \mathcal{N} \frac{\partial}{\partial T} \Big(T^2 \frac{\partial \ln \mathcal{Z}}{\partial T} \Big) = -T \frac{\partial^2 F}{\partial T^2} \;. \tag{12.6}$$

Da die Eigenvektoren $\psi^{(i)}$ von H eine ONB bilden, ergibt sich nach Funktionalkalkül

$$\begin{aligned} \mathcal{Z} &= \sum_i \langle \psi^{(i)}, e^{-\frac{H}{T}} \psi^{(i)} \rangle = \mathrm{Tr}(e^{-\frac{H}{T}}) \;, \\ U &= \frac{\mathcal{N}}{Z} \sum_i \langle \psi^{(i)}, H e^{-\frac{H}{T}} \psi^{(i)} \rangle = \mathcal{N} \frac{\mathrm{Tr}(H e^{-\frac{H}{T}})}{\mathrm{Tr}(e^{-\frac{H}{T}})} =: \mathcal{N} \cdot \langle H \rangle \;. \end{aligned} \tag{12.7}$$

Allgemein definieren wir den *thermodynamischen Erwartungswert* eines Operators A als

$$\langle A \rangle := \frac{\mathrm{Tr}(A e^{-\frac{H}{T}})}{\mathrm{Tr}(e^{-\frac{H}{T}})} \;. \tag{12.8}$$

Diese Formeln lassen die typische Problematik erahnen: $e^{-\frac{H}{T}}$ muß ein Spurklasse-Operator sein (außerdem A beschränkt relativ zu $e^{-\frac{H}{T}}$). Ist H nach oben unbeschränkt, so folgt $T \geq 0$. Wir nehmen jedoch die Positivität der Temperatur auch für Modelle mit beschränktem H an. In Modellen mit Bezug zur Quantenfeldtheorie ist $e^{-\frac{H}{T}}$ kein Spurklasse-Operator. Deshalb sind diese Modelle zu *regularisieren*, d.h. als Grenzwert einer Folge von Modellen zu schreiben, in denen $e^{-\frac{H}{T}}$ Spurklasse-Operator ist. Ziel ist es, für gewisse *renormierte* Erwartungswerte die Existenz des Limes zu beweisen.

Falls $e^{-\frac{H}{T}}$ für alle $T > 0$ Spurklasse-Operator ist und $A = A^*$ positiv und relativ beschränkt, dann gilt die Ungleichung

$$\langle A^2 \rangle - \langle A \rangle^2 = \frac{\mathrm{Tr}\big((A - \langle A \rangle)^2 e^{-\frac{H}{T}}\big)}{\mathrm{Tr}(e^{-\frac{H}{T}})} = \frac{\mathrm{Tr}\big(((A - \langle A \rangle) e^{-\frac{H}{2T}})^* ((A - \langle A \rangle) e^{-\frac{H}{2T}})\big)}{\mathrm{Tr}(e^{-\frac{H}{T}})} \geq 0 \;.$$

Aus dieser folgt z.B. $\frac{\partial U}{\partial T} = \frac{\mathcal{N}}{T^2}(\langle H^2\rangle - \langle H\rangle^2) \geq 0$. Somit ist die spezifische Wärme $c \geq 0$, und die Abhängigkeit $U(T)$ kann invertiert werden zu $T(U)$. Außerdem folgt aus (12.6), daß die freie Energie eine *konkave* Funktion der Temperatur ist.

Eine wichtige Klasse von Modellen sind Spin-Modelle. In diesen hängt die Energie in affiner Weise von einem äußeren Magnetfeld h ab, so daß wir $E^{(i)} \mapsto E^{(i)} - h\sigma^{(i)}$ schreiben. Teilchenzahlen und Zustandssumme im Magnetfeld werden somit zu

$$\mathcal{N}_i = \frac{\mathcal{N}}{\mathcal{Z}} e^{-\frac{E^{(i)}}{T} + \frac{h\sigma^{(i)}}{T}} \;, \qquad \mathcal{Z} := \sum_i e^{-\frac{E^{(i)}}{T} + \frac{h\sigma^{(i)}}{T}} \;. \tag{12.9}$$

Wir halten die Beziehungen (12.5) bei, d.h. Energie und Entropie bekommen eine Magnetfeld-Abhängigkeit. Zusätzlich können wir nun die *Magnetisierung*, d.h. den Gesamtspin, einführen:

$$M = \mathcal{N}\langle\sigma\rangle := \sum_i N_i \sigma^{(i)} = \mathcal{N}T \frac{\partial \ln Z}{\partial h} = -\frac{\partial F}{\partial h} \;. \tag{12.10}$$

Die nochmalige Ableitung nach h heißt *Suszeptibilität*:

$$\chi := \frac{\partial M}{\partial h} = -\frac{\partial^2 F}{\partial h^2} \;. \tag{12.11}$$

Es gilt wieder $\chi = \frac{\mathcal{N}}{T}(\langle\sigma^2\rangle - \langle\sigma\rangle^2) \geq 0$, so daß die freie Energie auch im Magnetfeld konkav ist.

Solange die Summen über i endliche Summen sind, ist F eine analytische Funktion von T, h. Im Limes zu unendlichen Reihen muß das aber nicht mehr gelten, und c, M, χ (bzw. deren Inverse) können an einer bestimmten kritischen Temperatur T_c divergieren. Empirisch findet man ein Potenzverhalten $f(T) = \text{const} \cdot (\frac{|T-T_c|}{T_c})^\kappa$ in der *reduzierten Temperatur* $\tau := \frac{|T-T_c|}{T_c}$, was später durch die Renormierungsgruppe bewiesen wird. Die $\kappa(f)$ heißen *kritischen Exponenten*, und wir schreiben $f \simeq \tau^\kappa$. Die folgenden kritischen Exponenten sind von Bedeutung:

$$\begin{aligned}
c &\simeq \tau^{-\alpha} && \text{für } T \to T_c \\
M &\simeq \tau^{\beta} && \text{für } T \nearrow T_c \\
\chi &\simeq \tau^{-\gamma} && \text{für } T \to T_c \;, \\
M(T{=}T_c, h) &\simeq h^{\frac{1}{\delta}} && \text{für } h \searrow 0 \;.
\end{aligned} \tag{12.12}$$

Gegebenenfalls führt man verschiedene Exponenten α, γ für links- und rechtsseitige Grenzwerte ein. Die Magnetisierung ist Null für $T > T_c$.

Daneben gibt es zwei weitere kritische Exponenten ν, η, die mit der *Korrelationslänge* ξ zusammenhängen. Bezeichne

$$\langle\sigma_j\sigma_k\rangle_c := \langle\sigma_j\sigma_k\rangle - \langle\sigma_j\rangle\langle\sigma_k\rangle = \frac{\mathrm{Tr}\big(\sigma_j\sigma_k\, e^{-\frac{E}{T}-\frac{h\sigma}{T}}\big)}{\mathrm{Tr}\big(e^{-\frac{E}{T}-\frac{h\sigma}{T}}\big)} - \frac{\mathrm{Tr}\big(\sigma_j\, e^{-\frac{E}{T}-\frac{h\sigma}{T}}\big)}{\mathrm{Tr}\big(e^{-\frac{E}{T}-\frac{h\sigma}{T}}\big)} \frac{\mathrm{Tr}\big(\sigma_k\, e^{-\frac{E}{T}-\frac{h\sigma}{T}}\big)}{\mathrm{Tr}\big(e^{-\frac{E}{T}-\frac{h\sigma}{T}}\big)} \tag{12.13}$$

den zusammenhängenden Teil der *Spin-Spin-Korrelationsfunktion* im D-dimensionalen Spin-Modell (σ_j ist verschieden von $\sigma^{(j)}$; wir präzisieren diese Beziehung im Isingmodell), dann gilt für $T \neq T_c$

$$\langle \sigma_j \sigma_k \rangle_c \simeq \frac{e^{-\frac{|j-k|}{\xi}}}{|j-k|^{D-2}} \qquad \text{für } |j-k| \to \infty\,, \qquad T \neq T_c\,. \tag{12.14}$$

Wir hatten ein ähnliches Verhalten bereits für die Wightman-Funktion kennengelernt, was wegen der Verbindung von Euklidischer QFT und Statistischer Physik nicht überrascht. Dort entsprach ξ der inversen Masse. Es zeigt sich nun, daß am kritischen Punkt die Korrelationslänge divergiert:

$$\xi \simeq \tau^{-\nu}\,. \tag{12.15}$$

Damit reduziert sich die Spin-Spin-Korrelation bei $T = T_c$ scheinbar auf $\frac{1}{|j-k|^{D-2}}$. In Wirklichkeit ist es etwas komplizierter, es kann eine *anomale Dimension* η auftreten:

$$\langle \sigma_j \sigma_k \rangle_c \simeq \frac{1}{|j-k|^{D-2+\eta}} \qquad \text{für } |j-k| \to \infty\,, \qquad T = T_c\,. \tag{12.16}$$

Die kritischen Exponenten sind nicht unabhängig. Eine elementare Rechnung zeigt simultane Konkavität der Freien Energie in h und T:

$$\Big(\frac{\partial}{\partial T} + \lambda\frac{\partial}{\partial h}\Big)^2 (T \ln \mathcal{Z}) = \Big\langle \Big(\frac{H - \sigma h}{T} + \lambda\sigma\Big)^2 \Big\rangle - \Big\langle \frac{H - \sigma h}{T} + \lambda\sigma \Big\rangle^2 \geq 0$$

für alle λ und deshalb (wie im Beweis von Cauchy-Schwarz)

$$\frac{c}{T} \cdot \chi \geq \Big(\frac{\partial M}{\partial T}\Big)^2\,. \tag{12.17}$$

Für $T \nearrow T_c$ und $h \searrow 0$ folgt $\tau^{-\alpha-\gamma} \geq \text{const} \cdot \tau^{2\beta-2}$ und deshalb die *Rushbrooke-Ungleichung*

$$\alpha + 2\beta + \gamma \geq 2\,. \tag{12.18}$$

Tatsächlich findet man in allen Modellen und auch experimentell sogar Gleichheit $\alpha + 2\beta + \gamma = 2$. Mit Renormierungsgruppenmethoden, auf die wir später eingehen, beweist man die *Widom-Identität* $\gamma = \beta(\delta - 1)$, aus der dann die *Griffith-Ungleichung* $\alpha + \beta(1+\delta) \geq 2$ (tatächlich eine Gleichung) folgt.

Für weitere Ungleichungen sei auf das Buch von Stanley verwiesen.

13 Das Isingmodell: Lösung für $D = 1$ und Molekularfeldnäherung

Das Isingmodell ist ein besonders einfaches Spielzeugmodell zum Verstehen der kritischen Phänomene im Ferromagneten. Es läßt sich in einer Dimensionen

($D = 1$) exakt lösen; mit deutlich größerem Aufwand und auch nur bei verschwindendem Magnetfeld für $D = 2$; für $D \geq 3$ dagegegen nur näherungsweise. Das Isingmodell hat für $D \geq 2$ einen Phasenübergang.

Wir betrachten ein D-dimensionales toroidales Gitter aus N^D Gitterpunkten $(\mathbb{Z}/N\mathbb{Z})^D$ und eine Abbildung

$$\sigma : (\mathbb{Z}/N\mathbb{Z})^D \ni n \mapsto \sigma_n \in \pm 1$$

Jedem Gitterpunkt n wird ein Spin σ_n zugeordnet, der nur die Werte ± 1 haben kann. Eine realistischere Beschreibung des Ferromagneten liefert das (später diskutierte) *Heisenberg-Modell*, in dem die Spins Werte $\sigma_n \in S^{D-1}$ auf der Einheitssphäre annehmen.

Die Summation über i in der Zustandssumme (12.9) läuft nun über die 2^{N^D} verschiedenen Spin-Konfigurationen. Wir können deshalb $i = (\sigma_1, \dots, \sigma_{N^D})$ als Binärzahl auffassen. Der Spin $\sigma^{(i)}$ der i-ten Konfiguration ist der Gesamtspin $\sigma^{(i)} = \sum_{n=1}^{N^D} \sigma_n$. Als Energie dieser Konfiguration wird die Korrelation *nächster Nachbarn* gewählt:

$$E^{(i)} = -J \sum_{\langle n,m \rangle} \sigma_n \sigma_m \; . \tag{13.1}$$

In D Dimensionen besitzt jeder Gitterpunkt genau $2D$ nächste Nachbarn. Summiert wird also in n über alle Gitterpunkte und für festes n über die mit $m_n = \{1, \dots, 2D\}$ numerierten nächsten Nachbarn. Für $J > 0$ ist der Grundzustand durch parallele Spins gegeben, d.h. bei $T = 0$ wird ein Ferromagnet realisiert.

Wir berechnen nun die Zustandssumme des Ising-Modells für $D = 1$. Es werden sich keine interessanten Effekte ergeben, aber das prinzipielle Vorgehen wird deutlich. Mit Identifikation $\sigma_{N+1} = \sigma_1$ gilt

$$\mathscr{Z} = \sum_{\sigma_1 = \pm 1} \cdots \sum_{\sigma_N = \pm 1} \prod_{n=1}^{N} \exp\Big(\frac{J}{T} \sigma_n \sigma_{n+1} + \frac{h}{2T} (\sigma_n + \sigma_{n+1}) \Big) = \mathrm{tr}(V^N) \; , \tag{13.2}$$

wobei

$$V = (V_{\sigma_n \sigma_{n+1}}) = \begin{pmatrix} e^{\frac{J+h}{T}} & e^{\frac{-J}{T}} \\ e^{\frac{-J}{T}} & e^{\frac{J-h}{T}} \end{pmatrix} \tag{13.3}$$

die *Transfer-Matrix* ist. Dabei haben wir den Spins $(\sigma_n, \sigma_{n+1}) \in (\pm, \pm)$ bijektiv auf die Matrixelemente $\begin{pmatrix} (++) & (+-) \\ (-+) & (--) \end{pmatrix}$ abgebildet. Die Zustandssumme berechnet sich nun durch Diagnalisierung von V: Wir haben für das charakteristische Polynom

$$\begin{aligned} &(e^{\frac{J+h}{T}} - \lambda)(e^{\frac{J-h}{T}} - \lambda) - e^{\frac{-2J}{T}} = 0 \\ \Rightarrow \quad &\lambda_\pm = e^{\frac{J}{T}} \cosh \frac{h}{T} \pm \sqrt{e^{\frac{2J}{T}} \sinh^2 \frac{h}{T} + e^{-\frac{2J}{T}}} \; . \end{aligned}$$

Dann ist $\mathcal{Z} = \mathrm{tr}(V^N) = \lambda_+^N + \lambda_-^N$, und für die freie Energie pro Teilchen und Gitterplatz gilt

$$\begin{aligned} f[h,T] &:= \lim_{N\to\infty} \frac{F}{N\cdot\mathcal{N}} = \lim_{N\to\infty} \frac{-T}{N} \ln Z[N,h,T] = -T\ln\lambda_+ \\ &= -J - T\ln\Big(\cosh\frac{h}{T} + \sqrt{\sinh^2\frac{h}{T} + e^{-\frac{4J}{T}}}\Big) \\ &\xrightarrow{h=0} -T\ln(2\cosh(J/T))\;. \end{aligned} \tag{13.4}$$

Die Magnetisierung pro Teilchen und Gitterplatz ergibt sich zu

$$m[h,T] = -\frac{\partial f[h,T]}{\partial h} = \frac{\sinh\frac{h}{T}}{\sqrt{\sinh^2\frac{h}{T} + e^{-\frac{4J}{T}}}} \xrightarrow{h=0} 0\;. \tag{13.5}$$

Somit gibt es keine eindimensionalen Ferromagneten. Gesamtenergie und spezifische Wärme folgen aus elementarer Rechnung; die Formeln sind aber länglich (siehe McCoy-Wu, Kapitel III.2). Wir geben deshalb nur die Ergebnisse für $h = 0$ an:

$$u(T,h=0) = -J\tanh\frac{J}{T}\;, \qquad c(T,h=0) = \frac{J^2}{T^2\cosh^2\frac{J}{T}}\;. \tag{13.6}$$

Als nächstes betrachten wir die Spin-Spin-Korrelation für $j < k$

$$\begin{aligned} \langle\sigma_j\sigma_k\rangle &= \frac{1}{\mathcal{Z}} \sum_{\sigma_1=\pm1}\cdots\sum_{\sigma_N=\pm1} \sigma_j\sigma_k \cdot \prod_{n=1}^{N} \exp\Big(\frac{J}{T}\sigma_n\sigma_{n+1} + \frac{h}{2T}(\sigma_n+\sigma_{n+1})\Big) \\ &= \frac{1}{\mathcal{Z}}\mathrm{tr}\Big(V^{j-1}S_jV^{k-j}S_kV^{N-k+1}\Big)\;, \qquad S_j = S_k := \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}\;, \end{aligned} \tag{13.7}$$

wobei V die Transfer-Matrix (13.3) ist und $S_j = (\sigma_j) = \begin{pmatrix} (\sigma_j)_{++} & 0 \\ 0 & (\sigma_j)_{--} \end{pmatrix}$ berücksichtigt wurde. Diagonalisierung $VW = W\Lambda$ von V, mit $\Lambda := \mathrm{diag}(\lambda_+, \lambda_-)$ und

$$W = \begin{pmatrix} w & 1 \\ 1 & -w \end{pmatrix}\;, \quad w := -e^{\frac{J}{T}}(e^{\frac{J-h}{T}} - \lambda_+) = e^{2\frac{J}{T}}\sinh\frac{h}{T} + \sqrt{1 + (e^{2\frac{J}{T}}\sinh\frac{h}{T})^2}\;,$$

führt mit $\tilde{W} := W^{-1}S_{\{j,k\}}W = \frac{1}{w^2+1}\begin{pmatrix} w^2-1 & 2w \\ 2w & 1-w^2 \end{pmatrix}$ auf

$$\begin{aligned} \langle\sigma_j\sigma_k\rangle &= \frac{1}{\mathcal{Z}}\mathrm{tr}\Big(\Lambda^{N-(k-j)}\tilde{W}\Lambda^{k-j}\tilde{W}\Big) \\ &= \frac{(w^2-1)^2}{(w^2+1)^2} + \frac{4w^2}{(w^2+1)^2}\frac{(\lambda_+^{N-(k-j)}\lambda_-^{k-j} + \lambda_-^{N-(k-j)}\lambda_+^{k-j})}{(\lambda_+^N + \lambda_-^N)} \\ &\xrightarrow{N\to\infty} \frac{\sin^2\frac{h}{T}}{\sin^2\frac{h}{T} + e^{-\frac{4J}{T}}} + \frac{e^{-\frac{4J}{T}}}{\sin^2\frac{h}{T} + e^{-\frac{4J}{T}}}\Big(\frac{\lambda_-}{\lambda_+}\Big)^{|k-j|}\;. \end{aligned} \tag{13.8}$$

(Das Endergebnis muß symmetrisch in $k \leftrightarrow j$ sein). Analog folgt

$$\langle\sigma_j\rangle = \frac{1}{\mathcal{Z}}\mathrm{tr}\Big(\Lambda^N\tilde{W}\Big) = \frac{w^2-1}{w^2+1}\frac{(\lambda_+^N-\lambda_-^N)}{(\lambda_+^N+\lambda_-^N)} \overset{N\to\infty}{\longrightarrow} \frac{\sin\frac{h}{T}}{\sqrt{\sin^2\frac{h}{T}+e^{-\frac{4J}{T}}}} \tag{13.9}$$

und somit für den zusammenhängenden Anteil

$$\lim_{N\to\infty}\langle\sigma_j\sigma_k\rangle_c = \frac{e^{-\frac{4J}{T}}}{\sin^2\frac{h}{T}+e^{-\frac{4J}{T}}}\Big(\frac{\lambda_-}{\lambda_+}\Big)^{|k-j|} \overset{h\to 0}{\longrightarrow} \Big(\tanh\frac{J}{T}\Big)^{|k-j|} . \tag{13.10}$$

Wir bestätigen den exponentiellen Abfall der Korrelation. Weitere Interpretationen hinsichtlich kritischer Exponenten sind unschlüssig, da es keinen echten kritischen Punkt gibt.

Als nächstes diskutieren wir am Beispiel des Isingmodells ein häufig benutztes Näherungsverfahren: die Molekularfeldnäherung (englisch: mean field theory). Wir folgen hier Abschnitt 1.1.4 in Grosse. Die Näherung besteht in der Vernachlässigung der Spin-Fluktuationen. Man ersetzt in (13.1) einen der Spins durch den Mittelwert $\langle\sigma\rangle = \frac{M}{\mathcal{N}\cdot N^D} = m[h,T]$, d.h. die Magnetisierung pro Spin und Gitterpunkt:

$$E^{(i)} \mapsto -2DJ\sum_{n=1}^{N^D}\sigma_n\langle\sigma\rangle = -2DJm[h,T]\sigma^{(i)} ,$$

denn jeder Gitterpunkt n hat $2D$ nächste Nachbarn. Die Zustandssumme wird somit zu

$$\begin{aligned}\mathcal{Z} &= \sum_i e^{\frac{2DJm[h,T]+h}{T}\sigma^{(i)}} = \sum_{\sigma_1=\pm1}\cdots\sum_{\sigma_{N^D}=\pm1}\prod_{n=1}^{N^D} e^{\frac{2DJm[h,T]+h}{T}\sigma_n} \\ &= \Big(2\cosh\frac{2DJm[h,T]+h}{T}\Big)^{N^D} . \end{aligned} \tag{13.11}$$

Andererseits war die Magnetisierung $\frac{M}{\mathcal{N}} = T\frac{\partial\ln\mathcal{Z}}{\partial h}$, d.h.

$$m[h,T] = \tanh\frac{2DJm[h,T]+h}{T} . \tag{13.12}$$

Für $h=0$ ändert sich das qualitative Verhalten an der kritischen Temperatur $T_c = 2DJ$: Für $T > T_c$ hat (13.12) die einzige Lösung $m[0,T]=0$, während es für $T < T_c$ drei Lösungen gibt. Unter Verwendung des Additionstheorems folgt

$$m = \frac{\tanh\frac{mT_c}{T}+\tanh\frac{h}{T}}{1+\tanh\frac{mT_c}{T}\tanh\frac{h}{T}} , \quad \tanh\frac{h}{T} = \frac{m-\tanh\frac{mT_c}{T}}{1-m\tanh\frac{mT_c}{T}} ,$$

das wir für kleine m in eine Potenzreihe entwickeln:

$$\tanh\frac{h}{T} = m\Big(1-\frac{T_c}{T}\Big) + m^3\Big(\frac{T_c}{T}\Big(1-\frac{T_c}{T}\Big) + \frac{T_c^3}{3T^3}\Big) + \mathcal{O}(m^5) \tag{13.13}$$

Sei nun $h = 0$. Der Koeffizient von $m^3[0,T]$ ist positiv in einer Umgebung von T_c. Somit gibt es für $T > T_c$ nur die triviale Nullstelle $m = 0$, während wir für $T < T_c$ als weitere Lösung

$$m\Big(\frac{T_c - T}{T_c}\Big) \simeq \frac{m^3}{3} \quad \Rightarrow \quad m \simeq \tau^{\frac{1}{2}} \quad \Rightarrow \quad \beta = \frac{1}{2} \tag{13.14}$$

erhalten. Setzen wir in (13.13) exakt $T = T_c$ und $h \neq 0$, so folgt

$$\frac{h}{T_c} \simeq \frac{m^3}{3} \quad \Rightarrow \quad m[h, T = T_c] \simeq h^{\frac{1}{3}} \quad \Rightarrow \quad \delta = 3\ . \tag{13.15}$$

Schließlich berechnen wir aus (13.13) die magnetische Suszeptibilität $\chi = \frac{\partial m[h,T]}{\partial h}$ über deren Inverses:

$$\frac{1}{T}\frac{\partial h}{\partial m} = \frac{1}{\chi T} = \frac{T - T_c}{T} + m^2\Big(\frac{3T_c}{T}\Big(\frac{T - T_c}{T}\Big) + \frac{T_c^3}{T^3}\Big)\ . \tag{13.16}$$

Sei nun $h = 0$. Dann haben wir $m = 0$ für $T > T_c$ und deshalb

$$T > T_c \quad \Rightarrow \frac{1}{\chi T_c} \simeq \tau \quad \Rightarrow \quad \gamma = 1\ . \tag{13.17}$$

Ist $T < T_c$, so müssen wir $m^2 = 3\tau$ aus (13.14) einsetzen:

$$T > T_c \quad \Rightarrow \frac{1}{\chi T_c} \simeq -\tau + 3\tau \quad \Rightarrow \quad \gamma = 1\ . \tag{13.18}$$

Wir finden also gleiche links- und rechtsseitge Expnenten γ; nur die Vorfaktoren sind verschieden. Wir bestätigen die Widom-Identität $\gamma = \beta(\delta - 1)$.

Die spezifische pro Spin und Gitterplatz war nach (12.6) definiert als

$$\begin{aligned}
\frac{c}{\mathcal{N}\cdot N^D} &= \frac{\partial}{N^D \partial T}\Big(T^2 \frac{\partial \ln \mathcal{Z}}{\partial T}\Big) \\
&= \frac{\partial}{\partial T}\Big(T^2 \tanh\frac{m[h,T]T_c + h}{T} \cdot \Big(-\frac{m[h,T]T_c + h}{T^2} + \frac{\frac{\partial m[h,T]}{\partial T}T_c + h}{T}\Big)\Big) \\
&= \frac{\big(\frac{m[h,T]T_c + h}{T} - \frac{\partial m[h,T]}{\partial T}T_c + h\big)^2}{\cosh^2\frac{m[h,T]T_c + h}{T}} \\
&\quad + \Big(h + T\frac{\partial^2 m[h,T]}{\partial T^2}T_c\Big)\tanh\frac{m[h,T]T_c + h}{T}\ .
\end{aligned} \tag{13.19}$$

Sei nun $h = 0$. Dann sind für $T > T_c$ die Magnetisierung m und alle Ableitungen identisch Null, somit auch $c = 0$. Für $T < T_c$ haben wir in *führender Ordnung*

$$m = \sqrt{\frac{3(T_c - T)}{T_c}} \quad \Rightarrow \quad m' = -\frac{\sqrt{3}}{2\sqrt{T_c}}(T_c - T)^{-\frac{1}{2}} \quad \Rightarrow \quad m'' = -\frac{\sqrt{3}}{4\sqrt{T_c}}(T_c - T)^{-\frac{3}{2}} \,.$$

Einsetzen in (13.19) liefert für $T \nearrow T_c$

$$\begin{aligned} \frac{c}{\mathcal{N} \cdot N^D} &= \frac{\big(-m + m'T_c\big)^2}{\cosh^2 m} + m'' T_c^2 \tanh m \\ &= \frac{\big(-\sqrt{3}\tau^{\frac{1}{2}} - \frac{\sqrt{3}}{2}\tau^{-\frac{1}{2}}\big)^2}{1} + \Big(-\frac{\sqrt{3}}{4}\tau^{-\frac{3}{2}}\Big) \cdot \sqrt{3}\tau^{\frac{1}{2}} = 3 + \mathcal{O}(1) \,. \end{aligned} \tag{13.20}$$

Der erhaltene Wert 3 ist nicht korrekt, da in Wirklichkeit $m = \sqrt{\frac{3(T_c - T)}{T}}$ ist und es deshalb reguläre Anteile in m', m'' gibt. In jedem Fall gilt jedoch, daß die spezifische Wärme eine Sprungstelle bei $T = T_c$ hat und sich in konstanter Weise von beiden Seiten dem kritischen Punkt nähert. Das bedeutet beidseitig $\alpha = 0$, und die Rushbrooke-Ungleichung ist tatsächlich eine Gleichung $\alpha + 2\beta + \gamma = 2$.

Wir sehen, daß die kritischen Exponenten der Molekularfeldnäherung *unabhängig von der Dimension D* sind. Tatsächlich zeigt eine numerische Behandlung, daß für $D \geq 4$ das Isingmodell sehr gut durch die Molekularfeldnäherung beschrieben wird. Das zwei- und dreidimensionale Isingmodell zeigt größere Abweichungen.

Schließlich sei bemerkt, daß die van der Waals-Gleichung der realen Gase ein kritisches Verhalten besitzt, welches identisch zur Molekularfeldnäherung ist. Der Beweis soll in den Übungen geführt werden. Die van der Waals-Gleichung beschreibt den Phasenübergang flüssig-gasförming, wobei die Dichtedifferenz beider Phasen die Rolle der Magnetisierung übernimmt. Es gibt eine kritische Temperatur, an der der Unterschied flüssig/gasförmig verschwindet.

14 2D-Isingmodell: Kramers-Wannier-Dualität

Es gibt verschiedene Methoden zur Lösung des zweidimensionalen Isingmodells. In grober Einteilung diagonalisiert man entweder die Transfer-Matrix, oder man setzt kombinatorische Techniken ein. Wir geben im nächsten Abschnitt eine feldtheoretische Diagonalisierung, die von Lieb-Mattis-Schultz vorgeschlagen wurde. Dieser Abschnitt ist einer von Kramers-Wannier entdeckten Dualität im Isingmodell zwischen hohen und tiefen Temperaturen gewidmet, aus der der Wert der kritischen Temperatur bereits bestimmt werden kann.

Wir setzen $h = 0$ und $K := \frac{J}{T}$. Dann gilt

$$\begin{aligned}\mathcal{Z} &= \sum_{\sigma_1,\dots,\sigma_{N^2}=\pm1} \prod_{\langle j,k\rangle} e^{K\sigma_j\sigma_k} = \sum_{\sigma_1,\dots,\sigma_{N^2}=\pm1} \prod_{\langle j,k\rangle} \big(\cosh K + \sigma_j\sigma_k \sinh K\big) \\ &= (\cosh K)^{2N^2} \sum_{\sigma_1,\dots,\sigma_{N^2}=\pm1} \prod_{\langle j,k\rangle} \big(1 + \sigma_j\sigma_k \tanh K\big) \;, \qquad (14.1)\end{aligned}$$

nach Entwicklung von $e^{K\sigma_j\sigma_k}$ in eine Potenzreihe und Resummierung der geraden und ungeraden Potenzen. Die letzte Zeile folgt aus der Tatsache, daß es in einem kubischen Gitter mit N^2 Gitterpunkten genau $4\cdot N^2$ halbe Kanten gibt oder $2\cdot N^2$ Paare nächster Nachbarn. Das Produkt wird ausmultiplizert und nach gleichen Potenzen von $\tanh^\ell K$ geordnet:

$$\prod_{\langle j,k\rangle} \big(1 + \sigma_j\sigma_k \tanh K\big) = 1 + \sum_{\ell=1}^{2N^2} \tanh^\ell K \sum_{\langle j_1,k_1\rangle,\dots,\langle j_\ell,k_\ell\rangle} (\sigma_{j_1}\sigma_{k_1}\cdots\sigma_{j_\ell}\sigma_{k_\ell}) \;.$$

Summiert wird über alle L-Tupel aus *verschiedenen* Paaren nächster Nachbarn. Die anschließende Summe über $\sigma_n = \pm1$ in (14.1) liefert

- 0 falls σ_n in ungerader Zahl in $(\sigma_{j_1}\sigma_{k_1}\cdots\sigma_{j_\ell}\sigma_{k_\ell})$ vorkommt,
- 2 falls σ_n in gerader Zahl in $(\sigma_{j_1}\sigma_{k_1}\cdots\sigma_{j_\ell}\sigma_{k_\ell})$ vorkommt.

Insgesamt ist $\sum_{\sigma_1,\dots,\sigma_{N^2}=\pm1}(\sigma_{j_1}\sigma_{k_1}\cdots\sigma_{j_\ell}\sigma_{k_\ell})$ gleich 0 (falls zumindest ein σ_n in ungerader Zahl vorkommt) oder 2^{N^2}:

$$\mathcal{Z} = 2^{N^2}(\cosh K)^{2N^2} \sum_{\ell=0,2,4,6,\dots} g(\ell) \tanh^\ell K \;, \qquad (14.2)$$

wobei $g(\ell)$ die Zahl der (nicht notwendig zusammenhängenden) Wege aus ℓ Kanten ist, die jeden Gitterpunkt mit einer geraden Zahl von Nachbarn verbinden. Die ersten dieser Zahlen sind $g(0) = 1$, $g(2) = 0$, $g(4) = N^2$, $g(6) = 2N^2$, $g(8) = \frac{N^2(N^2+3)}{2}$; sie genügen für die Hochtemperaturentwicklung (kleines K) von $\mathcal{Z}$. Im Prinzip läßt sich $\mathcal{Z}$ auf diese Weise berechnen. Das ist jedoch ein schwieriges kombinatorisches Problem, welches wir hier nicht behandeln.

Wir sehen uns nun eine andere Entwicklung der Zustandssumme an, die vor allem das Verhalten bei tiefen Temperaturen beschreibt. Bei $T = 0$ und unter Annahme eines infinitesimalen Magnetfelds sind alle Spins parallel $\sigma_n = +1$ und liefern einen Beitrag $\mathcal{Z}_0 = e^{2N^2K}$ zur Zustandssumme, da es DN^D Paare nächster Nachbarn gibt. Die weiteren Beiträge ordnet man nach der Zahl negativer Spins. Es gibt N^2 Möglichkeiten, genau einen Spin negativ zu wählen. In dessen Umfeld liefern $2D = 4$ der DN^D Paare nächster Nachbarn einen Beitrag $(e^{-K})^4$ statt $(e^{+K})^4$ zur Zustandssumme, insgesamt also $\mathcal{Z}_1 = e^{2N^2K}\cdot N^2e^{-8K}$. Im nächsten Schritt gibt es $\frac{N^2(N^2-1)}{2}$ Möglichkeiten, genau zwei Spins negativ zu wählen. Diese sind

- entweder benachbart, was zu jedem der N^2 ersten Spins auf 2 Möglichkeiten hinausläuft (horizontal+vertikal); hier gibt es 6 umgedrehte Paare,
- oder nicht benachbart, somit $\frac{N^2(N^2-5)}{2}$ Möglichkeiten; hier gibt es 8 umgedrehte Paare.

Es folgt $\mathcal{Z}_2 = e^{2N^2K} \cdot \big(2N^2e^{-12K} + \frac{N^2(N^2-5)}{2}e^{-16K}\big)$. Ein weiterer Beitrag mit e^{-16K} kommt von drei negativen Spins, die alle benachbart sind. Man überlegt sich, daß es $\frac{N^2 \cdot 4 \cdot 6}{3!} = 4N^2$ Möglichkeiten dazu gibt; hinzu kommen Beiträge mit e^{-20K} und e^{-24K}. Insgesamt entsteht die Entwicklung

$$\mathcal{Z} = e^{2N^2K} \cdot \big(1 + N^2e^{-8K} + 2N^2e^{-12K} + \frac{N^2(N^2+3)}{2}e^{-16K} + \dots\big) \tag{14.3}$$

Es ergeben sich exakt the kombinatorischen Faktoren der Hochtemperatorentwicklung! Das ist nicht überraschend, da sich beide Entwicklungen graphisch entsprechen. Um das zu sehen, zeichnet man für jedes Paar benachbarter Spins verschiedener Vorzeichen die symmetrische Mittelsenkrechte der Länge 1. Zeichnen wir $\bullet$ für Spin $+1$ und $\circ$ für Spin -1, so sind die ersten Beiträge

$$\begin{array}{ccccc} \bullet & \bullet & \bullet & \bullet & \bullet \\ \bullet & \bullet & \boxed{\circ} & \bullet & \bullet \\ \bullet & \bullet & \bullet & \bullet & \bullet \end{array} \qquad \begin{array}{ccccc} \bullet & \bullet & \bullet & \bullet & \bullet \\ \bullet & \boxed{\circ \;\; \circ} & & \bullet & \bullet \\ \bullet & \bullet & \bullet & \bullet & \bullet \end{array} \qquad \begin{array}{ccccc} \bullet & \bullet & \bullet & \bullet & \bullet \\ \bullet & \boxed{\circ} & \bullet & \boxed{\circ} & \bullet \\ \bullet & \bullet & \bullet & \bullet & \bullet \end{array} \tag{14.4}$$

Nach Verschiebung um eine halbe Kante, allgemein Übergang zum dualen Graphen, ergeben sich exakt die Wege aus ℓ Kanten, die jeden Gitterpunkt mit einer geraden Zahl von Nachbarn verbinden.

Wenn wir nun in (14.3) die Kopplungskonstante K redefinieren als

$$\begin{aligned} &\tanh K^* := e^{-2K} \quad \Rightarrow \quad \coth K^* - \tanh K^* = e^{2K} - e^{-2K} \\ &\qquad \Rightarrow \quad \sinh(2K)\sinh(2K^*) = 1 \quad \text{und} \quad \frac{\sinh(2K)}{\cosh^2(2K)} = \frac{\sinh(2K^*)}{\cosh^2(2K^*)}\,, \end{aligned} \tag{14.5}$$

so zeigt der Vergleich mit (14.2) die Gültigkeit der folgenden Identität *zumindest für die niedrigsten Ordnungen*:

$$\frac{\mathcal{Z}[N,K^*]}{(\coth(K^*))^{N^2}} = \frac{\mathcal{Z}[N,K]}{(2\cosh^2 K)^{N^2}} = \sum_{l=0,2,4,\dots} g(\ell)\tanh^\ell K\,. \tag{14.6}$$

Unter Verwendung von (14.5) läßt sich diese Fomel symmetrisieren z.B. zu

$$\Big(\frac{\sinh^2 K^*}{\sinh(4K^*)}\Big)^{N^2} \mathcal{Z}[N,K^*] = \Big(\frac{\sinh^2 K}{\sinh(4K)}\Big)^{N^2} \mathcal{Z}[N,K]\,. \tag{14.7}$$

Die Identität (14.6), die auf der Identifikation (14.4) von Paaren gegengesetzter Spins mit Wegen im dualen Giter beruht, ist nur richtig für $\ell < N^2$. Für größere ℓ

kommen Randeffekte ins Spiel: die Wege haben nicht genug Platz, und die Symmetrie $\sigma \leftrightarrow -\sigma$ wird gänzlich ignoriert. Die Fehler werden bei genügend kleine K bzw. K^* unterdrückt, so daß im Limes $N \to \infty$ die Gleichung (14.6) für kleine K bzw. K^* richtig ist. Damit gilt sie aber auch im gesamten Analytizitätsbereich. Bei gewissen kritischen Werten von K, K^* bricht die Analytizität zusammen. Nimmt man nun an, daß $\mathcal{Z}$ *nur einen kritischen Punkt hat*, so muß dieser bei $K = K^* = K_c$ liegen, d.h. bei $\sinh(2K_c) = 1$ oder $K_c = \frac{1}{2}\ln(1+\sqrt{2}) \approx 0.441$. Die exakte Rechnung bestätigt das. Auch die Gültigkeit der Dualität (14.7) läßt sich ohne Zurückführung auf eine Potenzreihenentwicklung beweisen.

15 Lösung des zweidimensionalen Isingmodells

15.1 Definition des Modells

Wir folgen Lieb-Mattis-Schultz, Review of Modern Physics (1964). Wir betrachten ein rechteckiges $N \times M$-Gitter mit Spin $\sigma_{nm} = \pm 1$ am Punkt (nm). Wir nehmen Periodizität $\sigma_{n,M+1} = \sigma_{n1}$ in M-Richtung an, während wir die N-Richtung an eine zusätzliche 0-te Reihe koppeln, welche einstellbare Randbedingungen vorgibt. Sei $\Sigma_n = (\sigma_{nm})_{m=1,\dots,M}$ die Konfiguration der n-ten Spin-Reihe, periodisch mit $\sigma_{n,M+1} = \sigma_{n1}$, so ist der Beitrag einer Konfiguration $(\sigma_0, \dots, \sigma_N)$ zur Zustandssumme gegeben durch

$$e^{-\frac{H(\Sigma_0,\dots,\Sigma_N)}{T}} = \exp\Big(\sum_{n=1}^{N}(H_n^0 + H_n^1 + H_n^2)\Big) \cdot e^{-\frac{H_0(\Sigma_0)}{T}} , \tag{15.1}$$

$$H_n^0 = \frac{h}{T}\sum_{m=1}^{M}\sigma_{nm} , \quad H_n^1 = K_1\sum_{m=1}^{M}\sigma_{n-1,m}\sigma_{nm} , \quad H_n^2 = K_2\sum_{m=1}^{M}\sigma_{nm}\sigma_{n,m+1} .$$

Die Zustandssumme kann dann reihenweise berechnet werden durch die Rekursionsformel

$$\begin{aligned}\mathcal{Z} &= \sum_{(\Sigma_N)\in(\pm1)^M} \mathcal{Z}_N(\Sigma_N) , \\ \mathcal{Z}_n(\Sigma_n) &= \exp(H_n^0 + H_n^2) \sum_{\Sigma_{n-1}\in(\pm1)^M} \big(\exp(H_n^1)\mathcal{Z}_{n-1}(\Sigma_{n-1})\big) ,\end{aligned} \tag{15.2}$$

und $\mathcal{Z}_0(\Sigma_0) = e^{-\frac{H_0(\Sigma_0)}{T}}$. Wegen $\sigma_{mn} = \pm 1$, somit $\sigma_{mn}^{2k} = 1$ und $\sigma_{mn}^{2k+1} = \sigma_{mn}$, hat $\mathcal{Z}_{N-1}(\Sigma_{N-1})$ eine Darstellung

$$\begin{aligned}&\mathcal{Z}_{N-1}(\sigma_{N-1,1}, \dots, \sigma_{N-1,M}) \\ &= a_0 + \sum_{m=1}^{M} a_m\sigma_{N-1,m} + \sum_{1\le m_1<m_2\le M} a_{m_1m_2}\sigma_{N-1,m_1}\sigma_{N-1,m_2} + \dots \\ &+ a_{12\dots M}\sigma_{N-1,1}\cdots\sigma_{N-1,M} .\end{aligned} \tag{15.3}$$

Entsprechend (15.2) ist diese Darstellung mit $\exp(H_N^1) = \prod_{m=1}^M \exp(K_1 \sigma_{Nm}\sigma_{N-1,m})$ zu multiplizieren und über $\Sigma_{N-1} = (\sigma_{N-1,m})_{m=1,\dots,M}$ zu summieren. Dabei treten nur zwei Möglichkeiten auf:

$$\sum_{\sigma_{N-1,m}=\pm 1} \exp(K_1 \sigma_{Nm}\sigma_{N-1,m}) 1 = 2\cosh(K_1\sigma_{Nm}) = 2\cosh(K_1) \;,$$

$$\sum_{\sigma_{N-1,m}=\pm 1} \exp(K_1 \sigma_{Nm}\sigma_{N-1,m}) \sigma_{N-1,m} = 2\sinh(K_1\sigma_{Nm}) = 2\sinh(K_1)\sigma_{Nm} \;.$$

Somit gilt, falls $\mathcal{Z}_{N-1}(\Sigma_{N-1})$ als Entwicklung (15.3) dargestellt wird, in der jeder Spin $\sigma_{N-1,m}$ aus Σ_{N-1} höchstens einmal vorkommt,

$$\begin{aligned} &\mathcal{Z}_N(\sigma_{N1},\dots,\sigma_{NM}) \\ &\quad = \exp(H_N^0 + H_N^2)(2\cosh K_1)^M \mathcal{Z}_{N-1}\big((\tanh K_1)\sigma_{N1},\dots,(\tanh K_1)\sigma_{NM}\big) \;. \end{aligned} \tag{15.4}$$

15.2 Fockraum-Darstellung

Im nächsten Schritt geben wir dieser Rekursionsformel eine Interpretation im Fockraum. Dazu betrachten wir die Eigenvektoren $v^\pm := \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 1 \\ \pm 1 \end{pmatrix}$ der ersten Pauli-Matrix σ^x zu den Eigenwerten ± 1 sowie die Matrizen

$$\sigma^+ = \frac{1}{2}\begin{pmatrix} 1 & -1 \\ 1 & -1 \end{pmatrix} \;, \qquad \sigma^- = \frac{1}{2}\begin{pmatrix} 1 & 1 \\ -1 & -1 \end{pmatrix} \;.$$

Wir betrachten den Hilbert-Raum

$$\mathcal{F}_M = \underbrace{\mathbb{C}^2 \otimes \cdots \otimes \mathbb{C}^2}_{M \text{ Faktoren}}$$

und definieren für $m \in \{1,\dots,M\}$ Operatoren $\sigma_m^\pm : \mathcal{F}_M \to \mathcal{F}_M$ als die Multiplikation mit $\sigma^\pm$ im m-ten Faktor,

$$\sigma_m^\pm(v_1 \otimes \cdots \otimes v_M) := v_1 \otimes \cdots \otimes v_{m-1} \otimes \sigma^\pm v_m \otimes v_{m+1} \otimes \cdots \otimes v_M \;,$$

und analog Operatoren σ_m als die Multiplikation mit $\sigma = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$ im m-ten Faktor. Es gelten die Kommutatorrelationen

$$[\sigma_m^\pm, \sigma_{m'}^\pm] = 0 \text{ für } m \neq m' \;, \qquad \{\sigma_m^+, \sigma_m^-\} = 1 \;,\; (\sigma_m^+)^2 = (\sigma_m^-)^2 = 0 \;. \tag{15.5}$$

Als Vakuum wählen wir in jedem Faktor den Eigenvektor von σ^x zum Eigenwert -1,

$$\Omega = \underbrace{v^- \otimes \cdots \otimes v^-}_{M \text{ Faktoren}} \;. \tag{15.6}$$

Dann gilt für alle $m = 1, \dots, M$

$$\sigma_m^- \Omega = 0 \;, \qquad \sigma_m^+ \Omega = \sigma_m \Omega \;. \tag{15.7}$$

Die Koeffizienten $a_{m_1 \dots, m_k}$ der Entwicklung (15.3) für $\mathcal{Z}_{N-1}(\Sigma_N)$ (Achtung: die Spin-Konfiguration ist verschoben!) definieren dann den Vektor

$$\begin{aligned} &\mathcal{Z}_{N-1}(\Sigma_N)\Omega \\ &= \Big(a_0 + \sum_{m=1}^{M} a_m \sigma_m^+ + \sum_{1 \leq m_1 < m_2 \leq M} a_{m_1 m_2} \sigma_{m_1}^+ \sigma_{m_2}^+ + \dots + a_{12\dots M} \sigma_1^+ \cdots \sigma_M^+ \Big) \Omega \end{aligned} \tag{15.8}$$

im Fockraum, wobei wir die Spins der N-ten Zeile abkürzen zu $\sigma_{Nm} \equiv \sigma_m$. Wegen $(\tanh K_1)^{\sigma_m^+ \sigma_m^-} = (1 - \sigma_m^+ \sigma_m^-) + (\tanh K_1)\sigma_m^+ \sigma_m^-$ ist die Ersetzung $\sigma_{Nm} \mapsto (\tanh K_1)\sigma_{Nm}$ in (15.4) durch Multiplikation mit dem Operator $(\tanh K_1)^{\sum_{m=1}^{M} \sigma_m^+ \sigma_m^-}$ gegeben. Ausgedrückt durch die duale Kopplungskonstante $\tanh K_1 = e^{-2K_1^*}$ folgt somit

$$\mathcal{Z}_N(\Sigma_N)\Omega = V_0' V_2' V_1 \mathcal{Z}_{N-1}(\Sigma_N)\Omega = (V_0' V_2' V_1)^N \mathcal{Z}_0(\Sigma_N)\Omega \tag{15.9}$$

mit

$$\begin{aligned} V_1 &:= (2\cosh K_1)^M e^{-2K_1^* \sum_{m=1}^{N} \sigma_m^+ \sigma_m^-} = (2\sinh(2K_1))^{\frac{M}{2}} e^{-2K_1^* \sum_{m=1}^{N} (\sigma_m^+ \sigma_m^- - \frac{1}{2})} \;, \\ V_2' &:= e^{K_2 \sum_{m=1}^{M} \sigma_m \sigma_{m+1}} \;, \qquad V_0' := e^{\frac{h}{T} \sum_{m=1}^{M} \sigma_m} \;. \end{aligned} \tag{15.10}$$

Nun überlegt man sich, daß die ursprüngliche Zustandssumme $\mathcal{Z} = \sum_{\Sigma_N \in (\pm 1)^M} \mathcal{Z}_N(\Sigma_N)$ nichts anderes ist als die Spur von $\mathcal{Z}_N$ aufgefaßt als Operator auf $\mathcal{F}_M$. Da σ spurfrei ist, überlebt allein der a_0-Koeffizient von $\mathcal{Z}_N(\Sigma_N)$ in der Entwicklung (15.3), d.h es gilt $\mathcal{Z} = a_0(\mathcal{Z}_N) \cdot \mathrm{tr}(1) = 2^M a_0(\mathcal{Z}_N)$. Andererseits ist $a_0(\mathcal{Z}_N)$ nach (15.8) genau der Vakuumerwartungswert, d.h.

$$\mathcal{Z} = 2^M \langle \Omega, \mathcal{Z}_N(\Sigma_N)\Omega \rangle = 2^M \langle \Omega, (V_0' V_2' V_1)^N \mathcal{Z}_0(\Sigma_N)\Omega \rangle \;. \tag{15.11}$$

In der Wirkung auf Ω oder $\sigma_m^+ \Omega$ gilt $\sigma_m = \sigma_m^+ + \sigma_m^-$:

$$\sigma v_- = \sigma^+ v_- = (\sigma^+ + \sigma_-) v_- \;, \qquad \sigma v_+ = v_- = (\sigma^+ + \sigma^-)\sigma^+ v_- \;.$$

Deshalb dürfen wir die Matrizen V_0', V_2' ersetzen durch

$$V_2 := e^{K_2 \sum_{m=1}^{M} (\sigma_m^+ + \sigma_m^-)(\sigma_{m+1}^+ + \sigma_{m+1}^-)} \;, \qquad V_0 := e^{\frac{h}{T} \sum_{m=1}^{M} (\sigma_m^+ + \sigma_m^-)} \;. \tag{15.12}$$

Wählen wir z.B. $\mathcal{Z}_0(\Sigma_N)\Omega = \frac{1}{2^M} V_0 V_2 \Omega$ unabhängig von Σ_N, so folgt

$$\begin{aligned} \mathcal{Z} &= \langle \Omega, (V_0 V_2 V_1)^N V_0 V_2 \Omega \rangle = \big\langle (V_2 V_0)^{\frac{1}{2}} \Omega, V^N (V_0 V_2)^{\frac{1}{2}} \Omega \big\rangle \;, \\ V &:= (V_0 V_2)^{\frac{1}{2}} V_1 (V_0 V_2)^{\frac{1}{2}} \;. \end{aligned} \tag{15.13}$$

Im Limes $N \to \infty$ können die Matrixelemente von $(V_0V_2)^{\frac{1}{2}}$ sowie der Diagonalisierungsmatrix gegen V^N logarithmisch vernachlässigt werden. Somit ist die Berechnung von $\mathcal{Z}$ wieder zurückgeführt auf die Berechnung des größten Spektralwerts von V. Problematisch dabei ist der gemischt-kommutative Charakter (15.5) der $\sigma_m^\pm$. Dieser kann durch eine nichtlineare (und nichtlokale) Jordan-Wigner-Transformation in rein fermionische (antikommutierende) Operatoren überführt werden.

15.3 Jordan-Wigner-Transformation

Die Jordan-Wigner Transformation lautet

$$c_m := \Big(\exp\Big(\pi\mathrm{i}\sum_{j=1}^{m-1}\sigma_j^+\sigma_j^-\Big)\Big)\sigma_m^- , \qquad c_m^\dagger := \Big(\exp\Big(\pi\mathrm{i}\sum_{j=1}^{m-1}\sigma_j^+\sigma_j^-\Big)\Big)\sigma_m^+ . \quad (15.14)$$

Wegen der Kommutativität $[\sigma_m^\pm, \sigma_k^\pm] = 0$ für $m \neq k$ genügt zur Berechnung der verschiedenen Produkte und (Anti-)Kommutatoren:

$$\Big(\exp\Big(\pi\mathrm{i}\sigma_j^+\sigma_j^-\Big)\Big)^2 = \Big(\exp\Big(\pi\mathrm{i}U\begin{pmatrix}1 & 0\\ 0 & 0\end{pmatrix}U^{-1}\Big)\Big)^2 = U\begin{pmatrix}-1 & 0\\ 0 & 1\end{pmatrix}^2 U^{-1} = 1 \quad (15.15)$$

für eine geeignete Matrix U sowie

$$e^{\pi\mathrm{i}\sigma_j^+\sigma_j^-}\sigma_j^- = \sigma_j^- , \qquad \sigma_j^- e^{\pi\mathrm{i}\sigma_j^+\sigma_j^-} = \sigma_j^- e^{\pi\mathrm{i}(1-\sigma_j^-\sigma_j^+)} = -\sigma_j^- e^{-\pi\mathrm{i}\sigma_j^-\sigma_j^+} = -\sigma_j ,$$

insgesamt also

$$\big\{\sigma_j^\pm, e^{\pi\mathrm{i}\sigma_j^+\sigma_j^-}\big\} = 0 , \qquad \big[\sigma_m^\pm, e^{\pi\mathrm{i}\sigma_j^+\sigma_j^-}\big] = 0 \quad \text{für } m \neq j . \quad (15.16)$$

Daraus folgen rein fermionische Antikommutatoren

$$\{C_m, C_{m'}^\dagger\} = \delta_{m,m'} , \qquad \{C_m, C_{m'}\} = \{C_m^\dagger, C_{m'}^\dagger\} = 0 . \quad (15.17)$$

Außerdem ergibt sich

$$c_m^\dagger c_m = \sigma_m^+\sigma_m^- \quad (15.18)$$

$$\Rightarrow \quad \sigma_m = \Big(\exp\Big(\pi\mathrm{i}\sum_{j=1}^{m-1}c_j^\dagger c_j\Big)\Big)c_m , \qquad \sigma_m^+ = \Big(\exp\Big(\pi\mathrm{i}\sum_{j=1}^{m-1}c_j^\dagger c_j^-\Big)\Big)c_m^\dagger$$

nach Kombination mit (15.14) und (15.15). Schließlich gilt für $m \leq M-1$

$$\begin{aligned} \sigma_m^+\sigma_{m+1}^- &= c_m^\dagger c_{m+1} , & \sigma_m^+\sigma_{m+1}^+ &= c_m^\dagger c_{m+1}^\dagger , \\ \sigma_m^-\sigma_{m+1}^+ &= -c_m c_{m+1}^\dagger , & \sigma_m^-\sigma_{m+1}^- &= -c_m c_{m+1} . \end{aligned} \quad (15.19)$$

Für $m = M$ ändern sich jedoch die Vorzeichen:

$$\sigma_M^+\sigma_1^- = -e^{\pi \mathrm{i}\sum_{j=1}^M c_j^\dagger c_j} c_M^\dagger c_1 \ , \qquad \sigma_M^+\sigma_1^+ = -e^{\pi \mathrm{i}\sum_{j=1}^M c_j^\dagger c_j} c_M^\dagger c_1^\dagger \ ,$$
$$\sigma_M^-\sigma_1^- = e^{\pi \mathrm{i}\sum_{j=1}^M c_j^\dagger c_j} c_M c_1 \ , \qquad \sigma_M^-\sigma_1^+ = e^{\pi \mathrm{i}\sum_{j=1}^M c_j^\dagger c_j} c_M c_1^\dagger \ . \tag{15.20}$$

Deshalb bleiben V_1, V_2 bis auf Vorzeichenwechsel quadratisch in $c, c^\dagger$. Dagegen wird der lineare Term in V_0 kompliziert, so daß die Lösung des $2D$-Isingmodells nur für $h = 0$ möglich ist. Setzen wir $h = 0$, dann kommen in V_1, V_2 nur gerade Potenzen der $c, c^\dagger$ vor. In Anwendung auf das Vakuum, das ebenfalls gerade ist, folgt $e^{\pi \mathrm{i}\sum_{j=1}^M c_j^\dagger c_j} = +1$ in jedem Zwischenzustand. Wir können dann die besondere Behandlung der Rand-Spins $m = M$ auffangen, indem wir *anti-periodische* Randbedingungen fordern:

$$c_{M+1} = -c_1 \ , \qquad c_{M+1}^\dagger = -c_1^\dagger \ . \tag{15.21}$$

Nun folgt

$$V_1 = (2\sinh(2K_1))^{\frac{M}{2}} e^{-2K_1^* \sum_{m=1}^M (c_m^\dagger c_m - \frac{1}{2})} \ ,$$
$$V_2 = e^{K_2 \sum_{m=1}^M (c_m^\dagger - c_m)(c_{m+1}^\dagger + c_{m+1})} \ . \tag{15.22}$$

15.4 Fourier-Transformation

Wir nehmen M gerade an. Die antiperiodischen Randbedingungen erlauben die Fourier-Transformation

$$c_m = \frac{e^{-\mathrm{i}\frac{\pi}{4}}}{\sqrt{M}} \sum_{q=\pm1,\pm3,\dots,\pm M-1} e^{\mathrm{i}\frac{\pi}{M}mq}\eta_q \ , \quad c_m^\dagger = \frac{e^{\mathrm{i}\frac{\pi}{4}}}{\sqrt{M}} \sum_{q=\pm1,\pm3,\dots,\pm M-1} e^{-\mathrm{i}\frac{\pi}{M}mq}\eta_q^\dagger \ . \tag{15.23}$$

Es folgt

$$\sum_{m=1}^M c_m^\dagger c_m = \sum_{q=\pm1,\dots,\pm M-1} \eta_q^\dagger \eta_q \ ,$$
$$\sum_{m=1}^M c_m^\dagger c_{m+1} = \sum_{q=\pm1,\dots,\pm M-1} e^{\mathrm{i}\frac{\pi}{M}q}\eta_q^\dagger\eta_q \ , \qquad \sum_{m=1}^M c_{m+1}^\dagger c_m = \sum_{q=\pm1,\dots,\pm M-1} e^{-\mathrm{i}\frac{\pi}{M}q}\eta_q^\dagger\eta_q \ ,$$
$$\sum_{m=1}^M c_m^\dagger c_{m+1}^\dagger = \sum_{q=\pm1,\dots,\pm M-1} \mathrm{i}e^{-\mathrm{i}\frac{\pi}{M}(-q)}\eta_q^\dagger\eta_{-q}^\dagger \ , \quad \sum_{m=1}^M c_m c_{m+1} = \sum_{q=\pm1,\dots,\pm M-1} (-\mathrm{i})e^{\mathrm{i}\frac{\pi}{M}(-q)}\eta_q\eta_{-q}$$

und deshalb

$$V_2^{\frac{1}{2}} V_1 V_2^{\frac{1}{2}} = (2\sinh(2K))^{\frac{M}{2}} \prod_{q=1,3,\dots,M-1} V_{2q}^{\frac{1}{2}} V_{1q} V_{2q}^{\frac{1}{2}} \ , \tag{15.24}$$
$$V_{1q} = e^{-2K_1^*(\eta_q^\dagger\eta_q + \eta_{-q}^\dagger\eta_{-q} - 1)} \ ,$$
$$V_{2q} = e^{2K_2\cos(\frac{\pi q}{M})(\eta_q^\dagger\eta_q + \eta_{-q}^\dagger\eta_{-q}) + 2K_2\sin(\frac{\pi q}{M})(\eta_{-q}^\dagger\eta_q^\dagger + \eta_q\eta_{-q})} \ .$$

Dabei wurde verwendet, daß alle V_{iq} untereinander kommutieren. Die Wurzel $V_{2q}^{\frac{1}{2}}$ ist einfach durch $2K_2 \mapsto K_2$ zu bilden. Die V_{iq} sind Endomorphismen des vierdimensionalen fermionischen Fockraums $\mathbb{C}^2 \otimes \mathbb{C}^2$. Wählen wir die Basis $(\eta_q^\dagger\Omega_q, \eta_{-q}^\dagger\Omega_q, \Omega, \eta_{-q}^\dagger\eta_q^\dagger\Omega_q)$, mit $\eta_q\Omega = \eta_{-q}\Omega = 0$, so sind diese Matrizen gegeben durch

$$V_{1q} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & e^{2K_1^*} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & e^{-2K_1^*} \end{pmatrix}, \tag{15.25}$$

$$V_{2q}^{\frac{1}{2}} = \begin{pmatrix} \begin{pmatrix} e^{K_2\cos\frac{\pi q}{M}} & 0 \\ 0 & e^{K_2\cos\frac{\pi q}{M}} \end{pmatrix} & 0 \\ 0 & \exp\begin{pmatrix} 0 & K_2\sin\frac{\pi q}{M} \\ K_2\sin\frac{\pi q}{M} & 2K_2\cos\frac{\pi q}{M} \end{pmatrix} \end{pmatrix}.$$

Die rechte untere Ecke in $V_{2q}^{\frac{1}{2}}$ berechnet sich zu

$$\begin{aligned} \exp\begin{pmatrix} 0 & K_2\sin\frac{\pi q}{M} \\ K_2\sin\frac{\pi q}{M} & 2K_2\cos\frac{\pi q}{M} \end{pmatrix} &= e^{K_2\cos\frac{\pi q}{M}} \cdot \exp\left(K_2\begin{pmatrix} -\cos\frac{\pi q}{M} & \sin\frac{\pi q}{M} \\ \sin\frac{\pi q}{M} & \cos\frac{\pi q}{M} \end{pmatrix}\right) \\ &= e^{K_2\cos\frac{\pi q}{M}}\left(\cosh K_2\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} + \sinh K_2\begin{pmatrix} -\cos\frac{\pi q}{M} & \sin\frac{\pi q}{M} \\ \sin\frac{\pi q}{M} & \cos\frac{\pi q}{M} \end{pmatrix}\right) \end{aligned}$$

Somit folgt

$$V_q := (V_{2q})^{\frac{1}{2}} V_{1q} (V_{2q})^{\frac{1}{2}} = (2\sinh(2K_1))^{\frac{M}{2}} e^{2K_2\cos\frac{\pi q}{M}} \begin{pmatrix} I & 0 \\ 0 & \mathcal{V}_q \end{pmatrix}, \tag{15.26}$$

$$\mathcal{V}_q = \begin{pmatrix} \begin{array}{c} (\cosh K_2 - \sinh K_2\cos\frac{q\pi}{M})^2 e^{2K_1^*} \\ + \sinh^2 K_2 \sin^2\frac{q\pi}{M} e^{-2K_1^*} \end{array} & \begin{array}{c} 2\sinh K_2 \sin\frac{q\pi}{M}\big(\cosh(2K_1^*)\cosh(K_2) \\ - \sinh(2K_1^*)\sinh K_2\cos\frac{q\pi}{M}\big) \end{array} \\ \begin{array}{c} 2\sinh K_2 \sin\frac{q\pi}{M}\big(\cosh(2K_1^*)\cosh(K_2) \\ - \sinh(2K_1^*)\sinh K_2\cos\frac{q\pi}{M}\big) \end{array} & \begin{array}{c} (\cosh K_2 + \sinh K_2\cos\frac{q\pi}{M})^2 e^{-2K_1^*} \\ + \sinh^2 K_2 \sin^2\frac{q\pi}{M} e^{2K_1^*} \end{array} \end{pmatrix}. \tag{15.27}$$

Die Eigenwerte $\lambda_\pm$ von $\mathcal{V}_q$ können ohne Rechnung abgelesen werden. Wegen $\lambda_+\lambda_- = \det\mathcal{V}_q = 1$ gilt (eventuell bis auf Vorzeichen) $\lambda_\pm = e^{\pm\epsilon_q}$, und aus der Spur folgt

$$\cosh\epsilon_q = \frac{1}{2}\mathrm{tr}(\mathcal{V}_q) = \cosh(2K_2)\cosh(2K_1^*) - \sinh(2K_2)\sinh(2K_2^*)\cos\left(\tfrac{q\pi}{M}\right). \tag{15.28}$$

Die positive Lösung $\epsilon_q > 0$ liefert den größten Eigenwert.

Insgesamt erhalten wir für den größten Eigenwert von $V_2^{\frac{1}{2}} V_1 V_2^{\frac{1}{2}}$:

$$\begin{aligned}
\Lambda_{\max}(V_2^{\frac{1}{2}} V_1 V_2^{\frac{1}{2}}) &= (2\sinh(2K))^{\frac{M}{2}} \prod_{q=1,3,\ldots,M-1} e^{2K_2 \cos\frac{\pi q}{M}} e^{\epsilon_q} \\
&= \left(\sqrt{(2\sinh(2K))}\exp\left(\frac{1}{2\pi}\cdot\frac{2\pi}{M}\sum_{q=1,3,\ldots,M-1}\epsilon_q\right)\right)^M \qquad (15.29)
\end{aligned}$$

wegen $\sum_{q=1,3,\ldots,M-1}\cos\frac{\pi q}{M} = 0$. Im Limes $M \to \infty$ konvergiert die Summe über q in ein Riemann-Integral, so daß bewiesen ist:

$$\lim_{M,N\to\infty}\frac{1}{MN}\ln\mathcal{Z} = \frac{1}{2}\ln(2\sinh(2K_1)) + \frac{1}{2\pi}\int_0^\pi dx\ \epsilon_x\ , \qquad (15.30)$$

$$\epsilon_x = \operatorname{arcosh}\Big(\cosh(2K_2)\cosh(2K_1^*) - \sinh(2K_2)\sinh(2K_1^*)\cos x\Big)\ .$$

Für die weitere Behandlung nehmen wir Symmetrie $M = N$ und $K_1 = K_2 = K$ an. Dann folgt aus (15.30) zusammen mit (14.5), daß

$$\lim_{N\to\infty}\frac{1}{N^2}\ln\frac{\mathcal{Z}[N,K]}{(2\sinh(2K))^{\frac{N^2}{2}}} = \frac{1}{2\pi}\int_0^\pi dx\ \operatorname{arcosh}\Big(\cosh(2K)\cosh(2K^*) - \cos x\Big)$$

existiert und symmetrisch unter $K \leftrightarrow K^*$ ist (Kramers-Wannier-Dualität).

15.5 Freie Energie und spezifische Wärme

Unter Verwendung von [Gradsteyn-Ryshik §4.224.9]

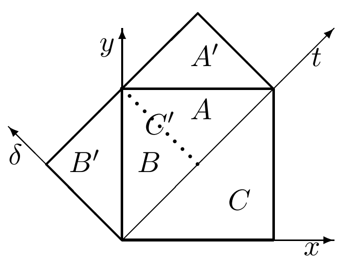
$$\frac{1}{\pi}\int_0^\pi dy\ \ln(2a \pm 2\cos y) = \ln(a + \sqrt{a^2-1}) = \operatorname{arcosh}(a)$$

folgt aus (15.30) für die freie Energiedichte f pro Teilchen und Gitterplatz,

$$-\frac{f}{T} = \frac{1}{2}\ln(2\sinh(2K)) + \frac{1}{2\pi^2}\int_0^\pi dx\int_0^\pi dy\ \ln\Big(2\frac{\cosh^2(2K)}{\sinh(2K)} - 2(\cos x + \cos y)\Big), \qquad (15.31)$$

wobei wieder $K_1 = K_2 = K$ gesetzt ist. Nach Umformen $2(\cos x + \cos y) = 4\cos\frac{x+y}{2}\cos\frac{x-y}{2}$ und Variablentransformation[2] zu $s = \frac{x+y}{2}$, $\delta = x - y$ erhalten

[2]Der Variablenwechsel ist ersichtlich aus



$C = C'$: $\cos(x) + \cos y \mapsto \cos(y) + \cos x$
$A = A'$: $\cos(\pi - y) \mapsto \cos(\pi + y)$
$B = B'$: $\cos(x) \mapsto \cos(-x)$

wir für das Integral

$$
\begin{aligned}
&\frac{1}{2\pi^2}\int_0^\pi dx \int_0^\pi dy\ \ln\Big(2\frac{\cosh^2(2K)}{\sinh(2K)} - 2(\cos x + \cos y)\Big)\\
&= \frac{1}{2\pi^2}\int_0^\pi d\delta \int_0^\pi ds\ \ln\Big(2\frac{\cosh^2(2K)}{\sinh(2K)} - 4\cos t\cos\frac{\delta}{2}\Big)\\
&= \frac{1}{2\pi}\int_0^\pi d\delta\Big(\ln(2\cos\tfrac{\delta}{2}) + \ln\Big(\frac{\cosh^2(2K)}{2\sinh(2K)\cos\frac{\delta}{2}} + \sqrt{\Big(\frac{\cosh^2(2K)}{2\sinh(2K)\cos\frac{\delta}{2}}\Big)^2 - 1}\Big)\Big)\\
&= \frac{1}{2}\ln\Big(\frac{\cosh^2(2K)}{\sinh(2K)}\Big) + \frac{1}{\pi}\int_0^{\frac{\pi}{2}} d\phi\ \ln\Big(1 + \sqrt{1 - \frac{4\sinh^2(2K)}{\cosh^4(2K)}\sin^2\phi}\Big) \qquad (15.32)
\end{aligned}
$$

Im letzten Schritt ist $\phi = \frac{\pi}{2} - \frac{\delta}{2}$ gesetzt. Insgesamt folgt

$$
\begin{aligned}
&f = -T\ln(2\cosh(2K)) - \frac{T}{\pi}\int_0^{\frac{\pi}{2}} d\phi\ \ln\Big(\frac{1}{2}\Big(1 + \sqrt{1 - \kappa^2\sin^2\phi}\Big)\Big)\ , \qquad (15.33)\\
&\kappa := \frac{2\sinh(2K)}{\cosh^2(2K)}\ , \qquad \kappa' := 2\tanh^2(2K) - 1\ , \qquad \Delta := \sqrt{1 - \kappa^2\sin^2\phi}\ .
\end{aligned}
$$

Die Dichte u der innenen Energie kann als $u = -T^2\frac{\partial\frac{f}{T}}{\partial T} = \frac{\partial(Kf)}{\partial K}$ geschrieben werden:

$$
\begin{aligned}
u &= -2J\tanh(2K) + \frac{J}{\pi}\kappa\frac{\partial\kappa}{\partial K}\int_0^{\frac{\pi}{2}} d\phi\ \frac{\sin^2\phi}{\Delta(1+\Delta)}\\
&= -2J\tanh(2K) + \frac{J}{\pi\kappa}\frac{\partial\kappa}{\partial K}\int_0^{\frac{\pi}{2}} d\phi\ \frac{1-\Delta}{\Delta} \qquad (15.34)
\end{aligned}
$$

Mit $-2\tanh(2K) - \frac{1}{2\kappa}\frac{\partial\kappa}{\partial K} = -\coth(2K)$ und $\frac{1}{\kappa}\frac{d\kappa}{dK} = -2\kappa'\coth(2K)$ folgt

$$
u = -J\coth(2K)\Big(1 + \frac{2}{\pi}\kappa'\boldsymbol{K}(\kappa)\Big)\ , \qquad \boldsymbol{K}(\kappa) := \int_0^{\frac{\pi}{2}} \frac{d\phi}{\sqrt{1 - \kappa^2\sin^2\phi}}\ . \qquad (15.35)
$$

Dabei ist $\boldsymbol{K}(\kappa)$ das elliptische Integral erster Art. Dieses divergiert für $\kappa \to 1$, das Produkt $\kappa'\boldsymbol{K}(\kappa)$ ist jedoch regulär. Wir zeigen nun, daß die Ableitung (also die spezifische Wärme) divergiert:

$$
\begin{aligned}
c = \frac{\partial u}{\partial T} = -\frac{K^2}{J}\frac{\partial u}{\partial K} &= 2K^2\coth^2(2K)(\tanh^2(2K) - 1)\Big(1 + \frac{2}{\pi}\kappa'\boldsymbol{K}(\kappa)\Big)\\
&+ \frac{2K^2}{\pi}\coth(2K)\Big(\frac{d\kappa'}{dK}\boldsymbol{K}(\kappa) + \kappa\kappa'\frac{d\boldsymbol{K}(\kappa)}{d\kappa}\frac{1}{\kappa}\frac{d\kappa}{dK}\Big)\ .
\end{aligned}
$$

Mit $\frac{d\kappa'}{dK} = 2\coth(2K)(1-(\kappa')^2) = 2\coth(2K)\kappa^2$ und unter Verwendung von[3]

$$\frac{d\boldsymbol{K}(\kappa)}{d\kappa} = \frac{1}{\kappa(1-\kappa^2)}\boldsymbol{E}(\kappa) - \frac{1}{\kappa}\boldsymbol{K}(\kappa)\ , \qquad \boldsymbol{E}(\kappa) := \int_0^{\frac{\pi}{2}} d\phi\, \sqrt{1-\kappa^2\sin^2\phi}$$

ergibt sich

$$c = \frac{2K^2}{\pi}\coth^2(2K)\Big(2\boldsymbol{K}(\kappa) - 2\boldsymbol{E}(\kappa) - (1-\kappa')\Big(\frac{\pi}{2} + \kappa'\boldsymbol{K}(\kappa)\Big)\Big)\ . \tag{15.36}$$

Somit divergiert die spezifische Wärme bei $\kappa = 1$, d.h. bei $\sinh(2K) = 1$ in Übereinstimmung mit der Vermutung aus der Kramers-Wannier-Dualität. Wegen $\boldsymbol{K}(\kappa) \xrightarrow{\kappa\to 1} \ln\frac{4}{\kappa'}$ handelt es sich um eine logarithmische Divergenz, d.h.

$$\alpha = 0\ . \tag{15.37}$$

Die weiteren kritischen Exponenten erfordern zumindest ein infinitesimales Magnetfeld und müssen von neu berechnet werden. Diese Rechnungen sind deutlich schwieriger als die hier vorgestellte Berechnung von $\alpha = 0$. Im Ergebnis einer komplizierten Rechnung (auf die wir nicht eingehen können) zeigt sich:

$$m \simeq (1-\sinh^{-4}(2K))^{\frac{1}{8}} \qquad \Rightarrow \qquad \beta = \frac{1}{8}\ . \tag{15.38}$$

Diese Beziehung wurde bereits von Onsager angegeben, jedoch ohne Beweis. Der erste Beweis stammt von Yang (1952), beruht aber auf Grenzübergänge in den Transfer-Matrizen, die nicht völlig schlüssig sind. Nachfolgende Beweise haben (15.38) schließlich bestätigt.

Der einfachste Weg, die weiteren kritischen Exponenten zu bestimmen, beruht auf der Renormierungsgruppe. Diese liefert folgende Relationen zwischen den kritischen Exponenten:

$$\alpha = 2 - D\nu\ , \quad \beta = \frac{\nu}{2}(D-2+\eta)\ , \quad \gamma = \nu(2-\eta)\ , \quad \delta = \frac{D+2-\eta}{D-2+\eta}\ . \tag{15.39}$$

Aus der spezifischen Wärme folgt $\nu = 1$, so daß die Bestimmung der anomalen Dimension η der Spin-Spin-Korrelation verbleibt. Dazu reicht es, das Ising-Modell *exakt am kritischen Punkt* $\kappa = 1$ zu kennen, was eine enorme Vereinfachung ist. Dieses kritische Ising-Modell hat sich als wegweisend für ein ganzes Gebiet der Physik, die konforme Feldtheorie, herausgestellt.

---

[3] folgt aus

$$\begin{aligned}
0 &= \int_0^{\frac{\pi}{2}} d\phi\, \frac{d}{d\phi}\frac{\sin\phi\cos\phi}{\sqrt{1-\kappa^2\sin^2\phi}} \\
&= \int_0^{\frac{\pi}{2}} d\phi\, \frac{1-2\sin^2\phi}{\sqrt{1-\kappa^2\sin^2\phi}} + \int_0^{\frac{\pi}{2}} d\phi\, \frac{(\kappa^2-1)\sin^2\phi + (1-\kappa^2\sin^2\phi)\cdot\sin^2\phi}{\big(\sqrt{1-\kappa^2\sin^2\phi}\big)^3} \\
&= \frac{1}{\kappa^2}\int_0^{\frac{\pi}{2}} d\phi\, \frac{(1-\kappa^2\sin^2\phi)-(1-\kappa^2)}{\sqrt{1-\kappa^2\sin^2\phi}} - \frac{(1-\kappa^2)}{\kappa}\frac{d}{d\kappa}\int_0^{\frac{\pi}{2}} d\phi\, \frac{1}{\sqrt{1-\kappa^2\sin^2\phi}}
\end{aligned}$$

16 Zur Beziehung zwischen Isingmodell und Fermion-Wirkung

Wir folgen Itzykson-Drouffe und skizzieren eine alternative Herleitung von (15.31) nach Samuel (1980), in der das Isingmodell mit einer Euklidischen Quantenfeldtheorie freier Fermionen identifiziert wird. Der Ausgangspunkt ist die Form (14.2) der Zustandssumme, welche sich als ein (Berezin-) Integral über *Graßmann-Variablen* schreiben läßt:

$$\mathcal{Z} = 2^{NM}(\cosh K)^{2NM} \int \Big(\prod_{n=1}^{N} \prod_{m=1}^{M} d\xi^v_{nm} d\bar{\xi}^v_{nm} d\xi^h_{nm} d\bar{\xi}^h_{nm} \Big)\, e^S, \tag{16.1}$$

$$\begin{aligned} S = \sum_{n=1}^{N}\sum_{m=1}^{M} \Big(&\tanh K (\bar{\xi}^h_{nm}\xi^h_{n+1,m} + \bar{\xi}^v_{nm}\xi^v_{n,m+1}) \\ &+ \bar{\xi}^h_{nm}\xi^h_{nm} + \bar{\xi}^v_{nm}\xi^v_{nm} + \bar{\xi}^v_{nm}\xi^h_{nm} + \bar{\xi}^h_{nm}\xi^v_{nm} + \bar{\xi}^v_{nm}\bar{\xi}^h_{nm} + \xi^v_{nm}\xi^h_{nm} \Big) \end{aligned}$$

Alle $\xi^{h,v}_{nm}, \bar{\xi}^{h,v}_{nm}$ antikommutieren miteinander, und das bis auf Vorzeichen einzige nichtverschwindende Integral (am Punkt nm) ist

$$\int d\xi^v_{nm} d\bar{\xi}^v_{nm} d\xi^h_{nm} d\bar{\xi}^h_{nm}\; \bar{\xi}^h_{nm}\xi^h_{nm}\bar{\xi}^v_{nm}\xi^v_{nm} := 1\,. \tag{16.2}$$

Entwickelt man e^S in eine Potenzreihe, so kann man den Beiträgen wieder eine graphische Interpretation geben. Die erste Zeile von S liefert ℓ^h horizontale und ℓ^v vertikale Kanten und einen Faktor $\tanh^{\ell^h+\ell^v}(K)$. Die Kanten müssen notwendig verbunden sein zu geschlossenen Linienzügen, die sich zwar kreuzen dürfen ($\bar{\xi}^h_{n-1,m}\xi^h_{nm}\bar{\xi}^h_{nm}\xi^h_{n+1,m}\bar{\xi}^v_{n,m-1}\xi^v_{nm}\bar{\xi}^v_{nm}\xi^v_{nm+1}$), aber nie tangential berühren $(\bar{\xi}^h_{nm}\xi^h_{n+1,m})^2 = 0$. An jedem Gitterpunkt nm müssen sich 4 Kanten (die Kreuzung), 2 Kanten (das Komplement wird durch genau einen Faktor der 2. Zeile von S geliefert) oder 0 Kanten (s.u.) treffen. Ein ungerades Produkt der Kanten (1. Zeile von S) erlaubt kein Komplement (aus der 2. Zeile von S) zum Integral (16.2). Das eigentliche Problem, auf das wir nicht eingehen, ist zu beweisen, daß das Berezin-Integral von Gitterpunkten, welche 0 Kanten tragen, genau die kombinatorischen Faktoren $g(\ell)$ liefert.

Wenn wir die Gültigkeit von (16.1) annehmen, so folgt nach Fourier-Transformation

$$\xi^{h,v}_{mn} = \frac{1}{4\pi^2}\int_{-\pi}^{\pi} dp \int_{-\pi}^{\pi} dq\; e^{\mathrm{i}(pn+qm)}\eta^{h,v}_{pq}\,, \quad \bar{\xi}^{h,v}_{mn} = \frac{1}{4\pi^2}\int_{-\pi}^{\pi} dp \int_{-\pi}^{\pi} dq\; e^{-\mathrm{i}(pn+qm)}\bar{\eta}^{h,v}_{pq} \tag{16.3}$$

mit $\underline{\eta_{pq}} := (\bar\eta^v_{pq}, \eta^v_{pq}, \bar\eta^h_{pq}, \eta^h_{pq})^t$ für die Wirkung

$$S = \frac{1}{2} \cdot \frac{1}{4\pi^2} \int_{-\pi}^{\pi} dp \int_{-\pi}^{\pi} dq \; \underline{\eta^t_{-p,-q}} R_{pq} \underline{\eta_{pq}} \tag{16.4}$$

$$R_{pq} := \begin{pmatrix} 0 & 1 + (\tanh K)e^{\mathrm{i}q} & 1 & 1 \\ -(1 + (\tanh K)e^{-\mathrm{i}q}) & 0 & -1 & 1 \\ -1 & 1 & 0 & 1 + (\tanh K)e^{\mathrm{i}p} \\ -1 & -1 & -(1 + (\tanh K)e^{-\mathrm{i}p}) & 0 \end{pmatrix} .$$

Nach einigen z.T. formalen Schritten folgt mit $\int d\eta_1 d\bar\eta_1 \cdots d\eta_n d\bar\eta_n \; e^{\langle \bar\eta, R\eta\rangle} = \det R$ für den Logarithmus der Zustandssumme

$$\frac{\ln \mathcal{Z}}{NM} = \ln(2\cosh^2 K) + \frac{1}{2} \cdot \frac{1}{4\pi^2} \int_{-\pi}^{\pi} dp \int_{-\pi}^{\pi} dq \;\ln\det R_{pq}$$

$$\det R_{pq} = \frac{1}{\cosh^4 K}\Big(\cosh^2(2K) - \sinh(2K)(\cos p + \cos q)\Big) \,, \tag{16.5}$$

in Übereinstimmung mit (15.31).

Die Wirkung (16.4) kann auf Blockdiagonalform transformiert werden:

$$\underline{\eta^t_{-p,-q}} R_{pq} \underline{\eta_{pq}} = \mathrm{i}\psi_{-p,-q} \begin{pmatrix} \lambda_{pq} J & 0 \\ 0 & \lambda'_{pq} J \end{pmatrix} \psi_{p,q} \,, \qquad J := \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ -1 & 0 \end{pmatrix} \tag{16.6}$$

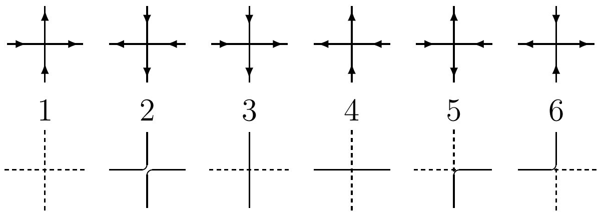
Einer der beiden Eigenwerte (z.B. λ_{pq}) verschwindet bei $T = T_c$ und $(p,q) = 0$, so daß der obere Block als freies masseloses Fermion angesehen werden kann. Dieses stellt die einfachste konforme Feldtheorie dar. Mit Techniken aus der konformen Feldtheorie (z.B. Di Francesco, Mathieu & Sénéchal) läßt sich dann $\eta = \frac{1}{4}$ beweisen, in Übereinstimmung mit $\beta = \frac{1}{8}$. Die anderen Exponenten ergeben sich aus (15.39) zu $\gamma = \frac{7}{4}$ und $\delta = 15$.

17 Das 6-Vertex-Modell

17.1 Das Eismodell

In einem Eiskristall bildet jedes der beiden H-Ionen im H_2O eine *Wasserstoffbrückenbindung* mit einem weiteren O-Ion. Es entsteht ein Gitter, in dem jedes O-Ion vier nächste O-Nachbarn hat. Jede Kante zwischen einem Paar benachbarter O-Gitterpunkte ist mit einem H-Ion besetzt. Dieses hat eine echte Bindung zu einem der O-Ionen (dem näheren) und eine Wasserstoffbrückenbindung zum anderen (entferntere) O-Ion. Dieser Unterschied wird durch *orientierte Kanten* beschrieben. In $D = 3$ bilden die O-Gitterpunkte alternierende Zentren und Ecken regulärer Tetraeder.

Wir betrachten das Eismodell in $D = 2$, d.h. ein ebenes $M \times N$-Gitter mit orientierten Kanten. Entsprechend der Eisregel hat jeder Gitterpunkt zwei einlaufende und zwei auslaufende Pfeile, so daß sich 6 mögliche Vertex-Typen ergeben (deshalb *6-Vertex-Modell*):



(17.1)

Geben wir dem Vertex i die Energie ϵ_i, so lautet die Zustandssumme

$$\mathcal{Z} = \sum_{\mathcal{C}\text{ - Eiskonfigurationen}} \exp\Big(-\frac{1}{T}\sum_{i=1}^{6} \epsilon_i m_i(\mathcal{C})\Big) , \tag{17.2}$$

wobei die Summe über alle Konfigurationen $\mathcal{C}$ läuft, die kompatibel mit der Eisregel ist. Mit $m_i(\mathcal{C})$ wird die Zahl der Typ-i-Vertices in der Konfiguration $\mathcal{C}$ bezeichnet.

Wir geben eine alternative Kodierung der Vertices. Wir zeichnen die Kante im Gitter, falls der Pfeil nach *links oder unten* zeigt; in den anderen Fällen (rechts oder oben) wird keine Kante gezeichnet (siehe untere Zeile in (17.1)). Bei Interpretation der Kreuzung in Vertex 2 als sich vermeidende Linien folgt für das unendliche oder periodische Gitter, daß diese Linien niemals beginnen, enden, kreuzen oder verzweigen.

Wir nehmen periodische Randbedingungen in vertikaler Richtung an (d.h. einen Zylinder) und starten mit n vertikalen Linien in der 0-ten Reihe. Die Eisregel impliziert, daß es im Streifen zwischen der j-ten und $(j+1)$-ten Reihe immer n vertikale Linien gibt, für alle j. Somit laufen die Linien ohne Kreuzung bis zur obersten Reihe. Jede Reihe hat n von unten kommende und n nach oben abgehende Linien, und Ankunfts- und Abgangspunkte wechseln sich ab. Die Summe über $\mathcal{C}$ zerfällt also

- in eine Summe über die Zahl n der Linien,
- für jedes solche n, und für jede der M Reihen, in eine Summe über die Positionen $X_n^j := (x_1^j, \dots, x_n^j)$ der vertikalen Kanten zwischen den Reihen $j-1$ und j (es gibt $\binom{N}{n}$ mögliche X_n^j),
- für jede Reihe j über die horizontalen Linienkonfigurationen, die mit X_n^j, X_n^{j+1} kompatibel sind.

Wir nehmen im weiteren $\epsilon_{2i-1} = \epsilon_{2i}$ für $i = 1, 2, 3$ an, d.h. fehlendes elektrisches Feld, und definieren $a := \exp(-\frac{\epsilon_1}{T})$, $b := \exp(-\frac{\epsilon_3}{T})$ and $c := \exp(-\frac{\epsilon_5}{T})$. Damit folgt nach periodischer Randbedingung $X_n^{M+1} = X_n^1$

$$\mathcal{Z} = \sum_{n=0}^{N} \sum_{X_n^1,\ldots,X_n^M} V_n(X_n^1, X_n^2) V_n(X_n^2, X_n^3) \cdots V_n(X_n^M, X_n^1) = \operatorname{tr}(V^M) \;, \tag{17.3}$$

$$V_n(X_n, Y_n) = \begin{cases} 0 & \text{falls } \nexists \text{ kompatible horizontale Verbindung zwischen } X_n \text{ and } Y_n \\ \displaystyle\sum_{\text{h.V.}} a^{m_1+m_2} b^{m_3+m_4} c^{m_5+m_6} & \text{falls die horizontale Verbindung h.V. } m_i \text{ Vertices vom Typ } i \text{ enthält.} \end{cases}$$

Es kann $\{0, 1, 2\}$ mit X_n, Y_n kompatible horizontale Verbindungen geben.

17.2 Bethe-Ansatz

Wie üblich müssen wir den größten Eigenwert Λ der $(2^N \times 2^N)$-Transfer-Matrix $V = \operatorname{diag}(V_0, V_1, \ldots, V_N)$ bestimmen; dann ist $\frac{\ln \mathcal{Z}}{M} \to \Lambda$. Das Eigenwertproblem lautet

$$\Lambda_n u(X_n) = \sum_{Y_n} V_n(X_n, Y_n) u(Y_n) \;, \qquad (u(Y_n)) \in \mathbb{C}^{\binom{N}{n}} \;, \tag{17.4}$$

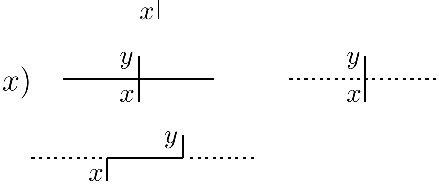
wobei die Summe über die $\binom{N}{n}$ Möglichkeiten für $1 \le y_1 < y_2 < \cdots < y_n \le N$ verläuft. Für $n = 0$ vertikale Linien ist $Y_0 = \varnothing$, und eine kompatible horizontale Linie ist entweder leer (d.h. sie besteht aus N Vertices vom Typ 1) oder voll (d.h. sie besteht aus N Vertices vom Typ 4). Das bedeutet $V_0(\varnothing, \varnothing) = a^N + b^N$, und der einzige Eigenwert ist $\Lambda_0 = a^N + b^N$.

Für $n = 1$ und $Y_1 = (y)$ sind drei Fälle zu unterscheiden:

- $y < x$: eine horizontale Linie von 1 bis y und von x bis N,
- $y = x$: entweder eine leere oder eine volle horizontale Linie,
- $y > x$: eine horizontale Linie zwischen x und y.

Das bedeutet

$$\begin{aligned} \Lambda_1 u(x) &= \sum_{y=1}^{x-1} b^{y-1} c a^{x-y-1} c b^{N-x} u(y) \\ &\quad + b^{x-1} a b^{N-x} u(x) + a^{x-1} b a^{N-x} u(x) \\ &\quad + \sum_{y=x+1}^{N} a^{x-1} c b^{y-x-1} c a^{N-y} u(y) \end{aligned} \tag{17.5}$$



Wir versuchen, den Eigenvektor über einen Ansatz zu bestimmen, den Bethe (1931) zur Lösung der eindimensionalen Atomkette benutzt hat: $u(y) = z^y$ für ein $z \in \mathbb{C}$. Mit diesem Ansatz ergibt sich

$$\Lambda_1 z^x = \frac{b^{N-x}a^{x-1}c^2 z}{a - bz}(1 - z^N) + b^N \frac{(a^2 - c^2) - abz}{ab - b^2 z} z^x + a^N \frac{ab + (c^2 - b^2)z}{a^2 - abz} z^x \; .$$

Wir wählen jetzt $z^N = 1$, um den ersten Term zu beseitigen. Die Gleichung hat N verschiedene Lösungen für z, aus der sich N verschiedene Paare $(\Lambda_1, u(x))$ von Eigenwerten und Eigenfunktionen ergeben:

$$\begin{aligned} \Lambda_1 &= a^N L(z) + b^N M(z) \; , \qquad u(x) = z^x \qquad \text{mit} \\ L(z) &= \frac{ab + (c^2 - b^2)z}{a^2 - abz} \; , \qquad M(z) = \frac{ab + (c^2 - a^2)z^{-1}}{b^2 - abz^{-1}} \; . \end{aligned} \tag{17.6}$$

Alle Eigenvektoren sind unabhängig von a, b, c, was sich später als wichtig erweisen wird.

Im Prinzip verfährt man für $n \geq 2$ genauso. Der Bethe-Ansatz lautet

$$u(x_1, \dots, x_n) = \sum_{(p_1,\dots,p_n)\in\mathcal{S}_n} A_{p_1\dots p_N} z_{p_1}^{x_1} z_{p_2}^{x_2} \cdots z_{p_n}^{x_n} \; . \tag{17.7}$$

Eingesetzt in die graphische Aufschlüsselung der Möglichkeiten analog zu (17.5) ergeben sich einige Terme, die den Bethe-Ansatz reproduzieren. Alle anderen müssen geschickt beseitigt werden. Bereits für $n = 2$ wird das sehr länglich (4 Seiten im Buch von Baxter). Wir zitieren deshalb nur das Endergebnis aus Baxter, Kapitel 8.4:

$$\Lambda_n = a^N L(z_1) \cdots L(z_n) + b^N M(z_1) \cdots M(z_n) \; . \tag{17.8}$$

Die Funktionen $L(z), M(z)$ sind *dieselben* wie in (17.6), nur die z_j sind entsprechend der Lösungen der Nebenbedingungen zu wählen:

$$\begin{aligned} z_j^N &= (-1)^{n-1} \prod_{l=1}^{n} \frac{s_{lj}(z_l, z_j)}{s_{jl}(z_j, z_l)} \; , \\ A_{p_1\dots p_n} &= \operatorname{sign}(p_1, \dots, p_n) \prod_{1\leq i<j\leq n} s_{p_j p_i}(z_{p_j}, z_{p_i}) \end{aligned} \tag{17.9}$$

mit

$$s_{ij}(z_i, z_j) = 1 - 2\Delta z_j + z_i z_j \; , \qquad \Delta := \frac{a^2 + b^2 - c^2}{2ab} \; . \tag{17.10}$$

17.3 Lösung der Konsistenzgleichungen

Nun wäre die Gleichung (17.9) zu lösen. Es zeigt sich, daß das Verhalten entscheidend von Δ abhängt. Für $\Delta > 1$ konnte Lieb (in einem Spezialfall) das Modell direkt lösen. Seine Lösung läßt sich so interpretieren, daß $\Lambda_0 = a^N + b^N$ der größte Eigenwert ist. Damit folgt für die freie Energiedichte $f = \min(\epsilon_1, \epsilon_3)$ *unabhängig* *von der Temperatur*: Man sagt, das System hat eingefrorene ferroelektrische Ordnung.

Wir beschränken uns deshalb im weiteren auf den Fall $\Delta < 1$. Die Lösung von (17.9) ist dann für endliche n, N unmöglich, führt aber im Limes $n, N \to \infty$ auf eine Integralgleichung. Eine intuitive Vorstellung über das Verhalten kann bereits im Spezialfall $n = 2$ erhalten werden. Dann ist $z_1^N = -\frac{s_{2,1}}{s_{1,2}}$ und $z_2^N = -\frac{s_{1,2}}{s_{2,1}}$, also $\tau := z_1 z_2$ eine N-te Einheitswurzel. Die zu diagonalisierende Matrix V_n hat nach (17.3) durchweg nichtnegative Einträge und fällt in die Irreduzibilitätsklasse, für die das Perron-Frobenius-Theorem gilt. Der Spektralradius von V liefert den betragsmäßig größten Eigenwert, dieser ist einfach, und linke und rechte Eigenvektoren (die Perron-Frobenius-Vektoren) lassen sich so wählen, daß alle Komponenten positiv sind. Nun führt der Bethe-Ansatz auf die Quasi-Periodizität $u(x_1 + 1, x_2 + 1) = \tau u(x_1, x_2)$. Dieses u kann nur dann Perron-Frobenius-Vektor sein, wenn $\tau = 1$ ist. Setzt man nun $z_2 = \frac{1}{z_1}$ in (17.9)+(17.10) ein, so folgt $(z_1^{N-1} + z_1)\Delta = 1 + z_1^N$. Mit dem Ansatz $z_1 = e^{\mathrm{i}k}$, und k möglicherweise komplex, ergibt sich

$$\Delta = \frac{\cos((r+1)k)}{\cos(rk)} , \qquad r := \frac{N}{2} - 1 .$$

Mit $A_{12} = s_{2,1} = -z_1^N s_{1,2}$ und $A_{21} = -s_{1,2}$ folgt aus dem Bethe-Ansatz (17.7) für den Eigenvektor zu $\tau = 1$ die Identität $u(x_1, x_2) = 2A_{21} z_1^{\frac{N}{2}} \cos(k(x_1 - x_2 + \frac{N}{2}))$. Wegen $x_1 - x_2 + \frac{N}{2} \in [-r, r]$ sind bei entsprechender Wahl von A_{21} diese $u(x_1, x_2)$ genau dann positiv, wenn $k \in [-\frac{\pi}{2r}, \frac{\pi}{2r}]$. Nun überlegt man sich graphisch, daß $\Delta = \frac{\cos((r+1)k)}{\cos(rk)} < 1$ für $\Delta < 1$ genau eine Lösung $k(r) \in \left]0, \frac{\pi}{2r}\right[$ hat und keine imaginäre Lösung. Das so bestimmte $z_1 = \frac{1}{z_2} = e^{\mathrm{i}k(r)}$ liefert nach dem Perron-Frobenius-Theorem den größten Eigenwert von V_2.

Für allgemeines n und $\Delta < 1$ *nehmen wir an*, daß wie im Fall $n = 1$ und $n = 2$ die Lösung für den größten Eigenwert zu finden ist in der Teilmenge $|z_j| = 1$ für alle j. Wir setzen also

$$z_j = e^{\mathrm{i}k_j} , \qquad \frac{s_{lj}}{s_{jl}} = e^{-\mathrm{i}\Theta(k_j, k_l)} . \tag{17.11}$$

Daß $\Theta(k_j, k_l)$ reell ist, bleibt zu zeigen: Aus (17.10) folgt

$$e^{-\mathrm{i}\Theta(p,q)} = \frac{1 - 2\Delta e^{\mathrm{i}p} + e^{\mathrm{i}(p+q)}}{1 - 2\Delta e^{\mathrm{i}q} + e^{\mathrm{i}(p+q)}} = \frac{\cos\frac{p+q}{2} - \Delta e^{\mathrm{i}\frac{p-q}{2}}}{\cos\frac{p+q}{2} - \Delta e^{-\mathrm{i}\frac{p-q}{2}}} ,$$

somit $\Theta(p, q)$ reell und gegeben durch

$$\frac{1}{2}\Theta(p, q) = \arctan\left(\frac{\Delta \sin\frac{p-q}{2}}{\cos\frac{p+q}{2} - \Delta\cos\frac{p-q}{2}}\right) . \tag{17.12}$$

Setzen wir den Ansatz (17.11) in (17.9) ein, so folgt

$$
\begin{aligned}
& e^{\mathrm{i}Nk_j} = (-1)^{n-1} \prod_{l=1}^{n} e^{\mathrm{i}\Theta(k_j,k_l)} && (17.13) \\
\Rightarrow \quad & Nk_j = -\sum_{l=1}^{n} \Theta(k_j,k_l) + 2\pi I_j \;, \qquad I_j \in \begin{cases} \mathbb{Z} & \text{für } n \text{ ungerade,} \\ \mathbb{Z}+\frac{1}{2} & \text{für } n \text{ gerade.} \end{cases}
\end{aligned}
$$

Wir bestätigen die Konsistenz des Ansatzes (17.11). Die I_j können innerhalb ihres Definitionsbereichs beliebig gewählt werden. Die Wahl $I_j = j - \frac{1}{2}(n+1)$ mit $j = 1, \ldots, n$ hat sich als sinnvoll herausgestellt; sie führt zu um 0 symmetrisch verteilten paarweise verschiedenen k_j und kleinster Ausdehnung.

Das gekoppelte System (17.13)+(17.12) ist für endliches n, N nicht geschlossen lösbar. Wir sind deshalb am Limes $n, N \to \infty$ interessiert. Nach (17.1) zählt n die nach oben gerichteten Pfeile jeder Reihe. Entsprechend betrachten wir $N, n \to \infty$ mit festgehaltener Wahrscheinlichkeit $\lim_{N,n\to\infty} \frac{n}{N} = p_\uparrow$, nach oben gerichtete Pfeile anzutreffen. Das Zählmaß $\sum_j \delta(k-k_j)dk$ wird im Limes gegen ein Maß $N\rho(k)$ konvergieren, welches normiert ist auf $\int_{-\infty}^{\infty} \rho(k)dk = \frac{n}{N}$. Mit der Wahl $I_j = j - \frac{1}{2}(n+1)$ entsteht

$$
\begin{aligned}
& Nk = -\pi(n+1) + 2\pi N \int_{-\infty}^{k} dk'\, \rho(k') - N \int_{-\infty}^{\infty} dk' \rho(k')\Theta(k,k') \\
\Rightarrow \quad & 2\pi\rho(k) = 1 + \int_{-\infty}^{\infty} dk'\, \rho(k') \frac{\partial\Theta(k,k')}{\partial k} && (17.14)
\end{aligned}
$$

Nach Einsetzen von (17.12) ist das eine lineare Integralgleichung zur Bestimmung von $\rho(k)$. Aus dieser Lösung sowie (17.8) folgt im Limes $N \to \infty$ für die freie Energiedichte

$$
\begin{aligned}
f &= -\lim_{N,M\to\infty} \frac{T \ln \mathcal{Z}}{NM} && (17.15) \\
&= \min\Big(\epsilon_1 - T\int_{-\infty}^{\infty} dk\, \rho(k) \ln(L(e^{\mathrm{i}k})), \epsilon_3 - T\int_{-\infty}^{\infty} dk\, \rho(k) \ln(M(e^{\mathrm{i}k}))\Big) \;.
\end{aligned}
$$

17.4 Variablentransformation

Wir gehen nicht auf die Lösungsansätze für (17.14) und die weitere Diskussion von (17.15) ein. Einzelheiten finden sich in Arbeiten von Lieb (1967) sowie im Buch von Baxter. Stattdessen sehen wir uns die von Baxter gefundenden algebraischen Besonderheiten der Parameter z_j des Bethe-Ansatzes an. Aus der abstrakten Formulierung dieser Strukturen hat sich das Gebiet der Quantengruppen entwickelt.

Ausgangspunkt ist die Beobachtung, daß die Eigenvektoren u über den Bethe-Ansatz (17.7) und die Lösung (17.9) nur von der Kombination Δ der Boltzmann-Faktoren a, b, c abhängen. Nur die Eigenvektoren (17.6) hängen individuell von

a, b, c ab. Somit werden Transfermatrizen zu gleichem Δ, aber verschiedenem a, b, c, simultan diagonalisiert, d.h. sie kommutieren.

Es erweist sich deshalb als sinnvoll, die a, b, c (für $\Delta < 1$) neu zu parametrisieren:

$$a = \rho \sinh \frac{\lambda - \nu}{2} \ , \quad b = \rho \sinh \frac{\lambda + \nu}{2} \ , \quad c = \rho \sinh \lambda \tag{17.16}$$

$$\begin{aligned} \Rightarrow \quad \Delta &= \frac{\sinh^2 \frac{\lambda-\nu}{2} + \sinh^2 \frac{\lambda+\nu}{2} - \sinh^2(\frac{\lambda+\nu}{2} + \frac{\lambda-\nu}{2})}{2 \sinh \frac{\lambda-\nu}{2} \sinh \frac{\lambda+\nu}{2}} \\ &= \frac{-2 \sinh^2 \frac{\lambda-\nu}{2} \sinh^2 \frac{\lambda+\nu}{2} - 2 \sinh \frac{\lambda-\nu}{2} \cosh \frac{\lambda+\nu}{2} \sinh \frac{\lambda+\nu}{2} \cosh \frac{\lambda-\nu}{2}}{2 \sinh \frac{\lambda-\nu}{2} \sinh \frac{\lambda+\nu}{2}} \\ &= - \cosh \lambda \ . \end{aligned}$$

Dabei sind ρ, λ, ν möglicherwise komplexe Variablen. Im Fall $-1 < \Delta < 1$ würden wir beispielsweise $\lambda \mapsto \mathrm{i}\lambda$ setzen, d.h. $\Delta = -\cos \lambda$, und analog für ν. Die Gleichung (17.9) zur Bestimmung der z_j kann nun mit folgendem Ansatz gelöst werden, in dem die ν_j in keiner Beziehung zu ν stehen:

$$z_j = \frac{\sinh \frac{\lambda - \nu_j}{2}}{\sinh \frac{\lambda + \nu_j}{2}} \ . \tag{17.17}$$

Dann folgt aus (17.10)

$$\begin{aligned} s_{ij} &= \frac{\sinh \frac{\lambda+\nu_i}{2} (\sinh \overbrace{\frac{\lambda+\nu_j}{2}}^{\lambda - \frac{\lambda-\nu_j}{2}} + \cosh \lambda \sinh \frac{\lambda-\nu_j}{2}) + \sinh \frac{\lambda-\nu_j}{2} (\cosh \lambda \sinh \frac{\lambda+\nu_i}{2} + \sinh \overbrace{\frac{\lambda-\nu_i}{2}}^{\lambda - \frac{\lambda+\nu_i}{2}})}{\sinh \frac{\lambda+\nu_i}{2} \sinh \frac{\lambda+\nu_j}{2}} \\ &= \frac{\sinh \frac{\lambda+\nu_i}{2} \sinh \lambda \cosh \frac{\lambda-\nu_j}{2} + \sinh \frac{\lambda-\nu_j}{2} \sin \lambda \cosh \frac{\lambda+\nu_i}{2}}{\sinh \frac{\lambda+\nu_i}{2} \sinh \frac{\lambda+\nu_j}{2}} \\ &= \frac{\sinh \lambda \sinh \frac{2\lambda + \nu_i - \nu_j}{2}}{\sinh \frac{\lambda+\nu_i}{2} \sinh \frac{\lambda+\nu_j}{2}} \ . \end{aligned} \tag{17.18}$$

und aus (17.6)

$$\begin{aligned} L(z_j) &= \frac{\sinh \frac{\lambda-\nu}{2} \sinh \frac{\lambda+\nu}{2} \sinh \frac{\lambda+\nu_j}{2} + \overbrace{(\sinh^2(\frac{\lambda+\nu}{2} + \frac{\lambda-\nu}{2}) - \sinh^2 \frac{\lambda+\nu}{2})}^{= \sinh \frac{3\lambda+\nu}{2} \sinh \frac{\lambda-\nu}{2}} \sinh \frac{\lambda-\nu_j}{2}}{\underbrace{\sinh^2 \frac{\lambda-\nu}{2} \sinh \frac{\lambda+\nu_j}{2} - \sinh \frac{\lambda-\nu}{2} \sinh \frac{\lambda+\nu}{2} \sinh \frac{\lambda-\nu_j}{2}}_{= \sinh \frac{\lambda-\nu}{2} \sinh \frac{\nu_j-\nu}{2} \sinh \lambda}} \\ &= \frac{\sinh \frac{\lambda+\nu}{2} \sinh(\lambda - \frac{\lambda-\nu_j}{2}) + \sinh(\lambda + \frac{\lambda+\nu}{2}) \sinh \frac{\lambda-\nu_j}{2}}{\sinh \frac{\nu_j-\nu}{2} \sinh \lambda} = - \frac{\sinh \frac{\nu - \nu_j + 2\lambda}{2}}{\sinh \frac{\nu-\nu_j}{2}} \ . \end{aligned} \tag{17.19}$$

Analog findet man

$$M(z_j) = -\frac{\sinh\frac{\nu-\nu_j-2\lambda}{2}}{\sinh\frac{\nu-\nu_j}{2}} \ . \tag{17.20}$$

Diese Formeln werden nun in (17.8) eingesetzt und wieder geschickt parametrisiert:

$$\Lambda_n(\rho,\lambda,\nu) = \frac{\phi(\lambda-\nu)q_n(\nu+2\lambda-2\pi\mathrm{i}) + \phi(\lambda+\nu)q_n(\nu-2\lambda+2\pi\mathrm{i})}{q_n(\nu)} \tag{17.21}$$

$$\text{mit} \quad \phi(\mu) := \rho^N \sinh^N\frac{\mu}{2} \ , \qquad q_n(\mu) := \prod_{l=1}^{n} \sinh\frac{\mu-\nu_l}{2} \ .$$

Dabei ist $\phi(\lambda-\nu) = a$ und $\phi(\lambda+\nu) = b$. Die Quotienten der q_n ergeben $\prod L(z_j)$ bzw. $\prod M(z_j)$, wenn man $\sinh(x \pm \mathrm{i}\pi) = -\sinh(x)$ berücksichtigt.

Nun ist nur noch (17.9) zu erfüllen. Diese Gleichung kann als die Forderung interpretiert werden, daß Λ_n eine *ganze Funktion* von ν ist: Wegen $q_n(\nu_j) = 0$ muß dann auch der Zähler an der Stelle ν_i verschwinden, d.h.

$$\frac{\phi(\lambda-\nu_j)}{\phi(\lambda+\nu_j)} = -\frac{q_n(\nu_j-2\lambda+2\pi\mathrm{i})}{q_n(\nu_j+2\lambda-2\pi\mathrm{i})} \quad \forall j = 1,\ldots,n \ . \tag{17.22}$$

Das bedeutet

$$\begin{aligned} z_j^N = \frac{\sinh^N\frac{\lambda-\nu_j}{2}}{\sinh^N\frac{\lambda+\nu_j}{2}} &= -\prod_{l=1}^{n} \frac{\sinh\frac{\nu_j-\nu_l-2\lambda+2\pi\mathrm{i}}{2}}{\sinh\frac{\nu_j-\nu_l+2\lambda-2\pi\mathrm{i}}{2}} \\ &= -(-1)^n \prod_{l=1}^{n} \frac{\sinh\frac{2\lambda+\nu_l-\nu_j}{2}}{\sinh\frac{2\lambda+\nu_j-\nu_l}{2}} = (-1)^{n-1} \prod_{l=1}^{n} \frac{s_{lj}}{s_{jl}} \ , \end{aligned}$$

nach Vergleich mit (17.17) und (17.18). Die Gleichungen (17.22) zur Bestimmung der ν_j haben mehrfache Lösungen. Zu zeigen, daß es genau $\binom{N}{n}$ sind, erfordert Arbeit; wir gehen nicht darauf ein. Wichtig ist, daß die Lösungen ν_j nur von λ abhängen, nicht aber von ν und ρ.

17.5 Kommutierende Transfermatrizen

Wir arrangieren die $\binom{N}{n}$ Eigenwerte Λ_n für jedes n in eine Diagonalmatrix $V_{D,n}$ und setzen diese als Diagonalblöcke in eine $2^N \times 2^N$-Diagonalmatrix V_D. Die Eigenvektoren $u(X_n) \in \mathbb{C}^{\binom{N}{n}}$ werden so mit Nullen zu einem Vektor $U(X_n) \in \mathbb{C}^{2^N}$ aufgefüllt, daß das Eigenwertproblem $V_D U(X_n) = \Lambda_n U(X_n)$ entsteht. Setzen wir die 2^N verschiedenen Spalten $U(X_n)$ nebeneinander zu einer $2^N \times 2^N$-Matrix U, dann lautet das Eigenwertproblem

$$V = U V_D U^{-1} \ .$$

Die Matrizen V, V_D hängen von allen drei Parametern (ρ, λ, ν) ab, während U nur eine Funktion von λ ist. Die wichtige Abhängigkeit is jene von ν, so daß wir von nun an $V(\nu)$ und $V_D(\nu)$ schreiben. Das zentrale Ergebnis der obigen Überlegungen ist, daß die Transfermatrizen $V(\nu)$ zu verschiedenen ν (aber gleichem λ) miteinander kommutieren:

$$V(\nu)V(\nu') = V(\nu')V(\nu) \ . \tag{17.23}$$

Völlig analog setzen wir die $\binom{N}{n}$ Zahlen $q_n(\mu)$ (da es $\binom{N}{n}$ Lösungen ν_j gibt) in eine $2^N \times 2^N$-Diagonalmatrix $Q_D(\mu)$ ein. Definiert man nun $Q(\mu) := UQ_D(\mu)U^{-1}$, so wird aus der Relation (17.21) (ϕ bleibt scalar)

$$V(\nu)Q(\nu) = \phi(\lambda - \nu)Q(\nu + 2\lambda - 2\pi\mathrm{i}) + \phi(\lambda + \nu)Q(\nu - 2\lambda + 2\pi\mathrm{i}) \ . \tag{17.24}$$

Per Konstruktion kommutiert $Q(\nu)$ mit beliebigen $Q(\nu')$ und $V(\nu')$.

Nach Baxter kann man nun die Lösung des Eismodells aus folgenden algebraischen Forderungen gewinnen:

Definition 17.1 i) Seien a, b, c nach (17.16) durch ρ, λ, ν ausgedrückt. Dann kommutieren für festes λ, ρ zwei beliebige Transfermatrizen $V(\nu), V(\nu')$.

ii) Es gibt Matrizen $Q(\nu)$ mit $\det Q(\nu)$ nicht identisch Null, die mit allen $Q(\nu'), V(\nu')$ kommutieren und (17.24) erfüllen, für eine geeignete skalare Funktion ϕ.

iii) Die Matrizen $V(\nu)$ und $Q(\nu)$ sind ganze Funktionen von ν. Die Eigenwerte von $Q(\nu)$ haben eine Darstellung $\sum_r D_r \exp(\frac{\nu r}{2})$, mit $r \in \mathbb{Z}$ oder $r \in \mathbb{Z} + \frac{1}{2}$ und $-N \leq r \leq N$.

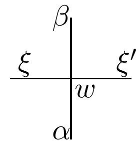
Wir überprüfen, daß diese Forderungen auf die vorherigen Gleichungen führen. Die verschwindenden gegenseitigen Kommutatoren implizieren simultane Diagonalisierbarkeit $V(\nu) = U \operatorname{diag}(\Lambda(\nu))\, U^{-1}$ und $Q(\nu) = U \operatorname{diag}(q(\nu))\, U^{-1}$, mit U unabhängig von ν. Die Diagonaleinträge der Gleichung (17.24) führen dann auf (17.21) zumindest für jene ν, für die $\det Q(\nu) \neq 0$ ist. Aus iii) folgt eine polynomiale Faktorisierbarkeit $q(\nu) = \prod_{l=1}^{n} \sinh \frac{\nu - \nu_l}{2}$ mit $0 \leq n \leq N$ und gewissen Nullstellen ν_l. Nun folgt (17.22) aus der Ganzheit von $V(\nu)$, und die Lösung dieser Gleichungen liefert die Eigenwerte Λ_n.

18 Algebraische Lösung des Eismodells

18.1 Kommutierende Transfermatrizen

Wir gehen zurück zur Ausgangsformulierung des Eismodells (erste Zeile von (17.1), die Linien werden nicht mehr betrachtet). Sei $V_{\underline{\alpha}\underline{\beta}}$ die Transfermatrix einer Zeile, parametrisiert durch die Orientierungen $\underline{\alpha} = (\alpha_i)$ der vertikalen Pfeile unter der Reihe und analog $\underline{\beta} = (\beta_i)$ für die vertikalen Pfeile über der Reihe. Diese Zeile ist Produkt

$$V_{\underline{\alpha}\underline{\beta}} = \sum_{\underline{\xi}} w_{\xi_1\alpha_1|\beta_1\xi_2} w_{\xi_2\alpha_2|\beta_2\xi_3} \cdots w_{\xi_N\alpha_N|\beta_N\xi_1} \;, \qquad w_{\xi\alpha|\beta\xi'} = \tag{18.1}$$



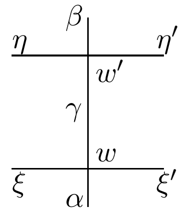
von Vertex-Faktoren $w \in \{0, a, b, c\}$ je nach Typ des Vertex. Die Summe läuft über die möglichen horizontalen Orientierungen $\underline{\xi}$, die mit der Eisregel kompatible sind. Da sich horizontale und vertikale Pfeile nicht mischen, können wir die Orientierungen wie folgt zusammenfassen: $+ = \{\uparrow, \rightarrow\}$ und $- = \{\downarrow, \leftarrow\}$. Dann gibt es genau die folgenden nichtverschwindenden Vertex-Faktoren:

$$w_{++|++} = w_{--|--} == a \;, \quad w_{+-,-+} = w_{-+|+-} = b \;, \quad w_{+-|+-} = w_{-+|-+} = c \;. \tag{18.2}$$

Unser Ziel ist es, die Kommutativität zweier Transfermatrizen V, V' zu verschiedenen Faktoren w, w' zu studieren. Das Produkt ist die Summe über die vertikalen Orientierungen $\underline{\gamma}$ zwischen beiden Zeilen:

$$(VV')_{\underline{\alpha}\underline{\beta}} = \sum_{\underline{\gamma}} V_{\underline{\alpha}\underline{\gamma}} V_{\underline{\gamma}\underline{\beta}} = \sum_{\underline{\xi},\underline{\eta}} S_{\xi_1\eta_1|\xi_2\eta_2|\alpha_1\beta_1} S_{\xi_2\eta_2|\xi_3\eta_3|\alpha_2\beta_2} \cdots S_{\xi_N\eta_N|\xi_1\eta_1|\alpha_N\beta_N} \tag{18.3}$$

$$S_{\xi\eta|\xi'\eta'|\alpha\beta} = \sum_{\gamma=\pm} w_{\xi\alpha|\gamma\xi'} w'_{\eta\gamma|\beta\eta'} = \sum_{\gamma=\pm}$$



Die dabei auftretenden Faktoren S haben folgende Interpretation: Sei W der 2-dimensionale Vektorraum mit Basis (e_+, e_-). Dann fassen wir für festgehaltene (α, β) die Faktoren $S_{\xi\eta|\xi'\eta'|\alpha\beta}$ als lineare Abbildung $S(\alpha, \beta) : W \otimes W \to W \otimes W$ auf, definiert durch

$$\big(S(\alpha, \beta)(x, y)\big)_{\xi,\eta} =: \sum_{\xi',\eta'} S_{\xi\eta|\xi'\eta'|\alpha\beta} x_{\xi'} y_{\eta'} \;. \tag{18.4}$$

Das Produkt (18.3) kann nun abkürzend geschrieben werden als

$$(VV')_{\underline{\alpha}\underline{\beta}} = \mathrm{tr}_{W\otimes W}\Big(\prod_{i=1}^{N} S(\alpha_i, \beta_i)\Big) \;. \tag{18.5}$$

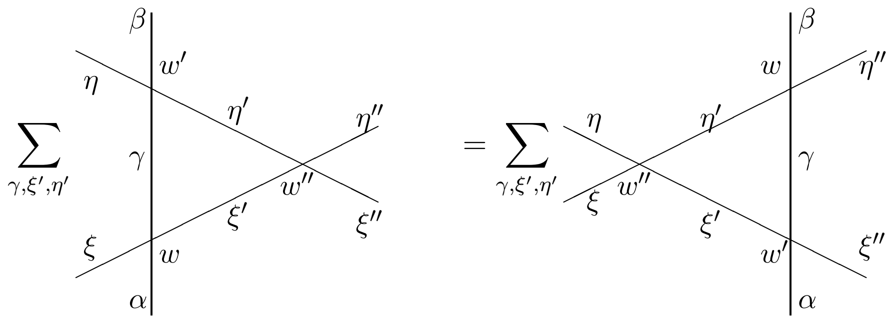
Analog ist das umgekehrte Produkt

$$(V'V)_{\underline{\alpha}\underline{\beta}} = \mathrm{tr}_{W\otimes W}\Big(\prod_{i=1}^{N} S'(\alpha_i, \beta_i)\Big) \;, \quad S'_{\xi\eta|\xi'\eta'|\alpha\beta} = \sum_{\gamma=\pm} w'_{\xi\alpha|\gamma\xi'} w_{\eta\gamma|\beta\eta'} \;. \tag{18.6}$$

Hinreichend für Kommutativität $VV' = V'V$ ist $S(\alpha, \beta) = TS'(\alpha, \beta)T^{-1}$ für eine lineare invertierbare Abbildung $T : W \otimes W \to W \otimes W$ unabhängig von α, β. Wir bezeichnen die Matrix-Elemente von $T \in \mathrm{Aut}(W \otimes W)$ mit $w''_{\eta\xi|\eta'\xi'}$. Dann bedeutet $ST = TS'$:

$$\sum_{\gamma,\xi',\eta'=\pm} w_{\xi\alpha|\gamma\xi'} w'_{\eta\gamma|\beta\eta'} w''_{\eta'\xi'|\eta''\xi''} = \sum_{\gamma,\xi',\eta'=\pm} w''_{\eta\xi|\eta'\xi'} w'_{\xi'\alpha|\gamma\xi''} w_{\eta'\gamma|\beta\eta''} \ . \tag{18.7}$$

Diese Identität läßt sich graphisch interpretieren als Umformung zwischen zwei Dreiecken:



(18.8)

Wegen $\alpha, \beta, \xi, \eta, \xi', \eta' = \pm$ ist (18.7) ein System aus $2^6 = 64$ Gleichungen. Wir nehmen an, daß neben $w \in \{a, b, c\}$ und $w' \in \{a', b', c'\}$ auch w'' die gleiche Form (18.2) hat, nur mit Parametern $w'' \in \{a'', b'', c''\}$. Das Problem läßt sich durch Symmetriebetrachtungen auf 6 Gleichungen reduzieren, von denen 3 identisch erfüllt sind (siehe Baxter §9.6). Die verbleibenden 3 Gleichungen sind

$$\begin{pmatrix} ac' & -bc' & -ca' \\ 0 & cc' & ba' - ab' \\ cb' & -ca' & -bc' \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} a'' \\ b'' \\ c'' \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} . \tag{18.9}$$

Damit T invertierbar ist, suchen wir nichttriviale Lösungen, d.h. die Matrix hat verschwindende Determinante. Unter der Annahme $a, b, c, a', b', c' \neq 0$ folgt $\Delta = \Delta'$ mit Δ gegeben durch (17.10). Wir bestätigen also das vorherige Resultat aus dem Bethe-Ansatz: Verschiedene Transfermatrizen mit gleichem Δ kommutieren.

Nun geht es darum, a, b, c neu zu parametrisieren, so daß V eine *ganze Funktion* wird. Mit $b = ax$ folgt $c = a\sqrt{1 - 2\Delta x + x^2} = a\sqrt{(x - x_1)(x - \frac{1}{x_1})}$ mit $\Delta = \frac{1}{2}(x_1 + \frac{1}{x_1})$. Die Wurzel läßt sich vermeiden durch den Ansatz $t^2 = \frac{x - x_1}{x - \frac{1}{x_1}}$. Mit $x = \frac{x_1^2 - t^2}{x_1(1-t^2)}$ und Redefinition von a zur Beseitigung des Nenners ergibt sich

$$a = \rho' x_1(1 - t^2) \ , \qquad b = \rho'(x_1^2 - t^2) \ , \qquad c = \rho'(x_1^2 - 1)t \ , \tag{18.10}$$

während Δ nur von x_1 abhängt. Es ist nun nicht schwer, auf die Variablen (17.16) aus dem Bethe-Ansatz zu transformieren:

$$x_1 = -e^{-\lambda} \ , \qquad 2\rho' x_1 t = \rho \ , \qquad t = e^{\frac{\nu - \lambda}{2}} \ . \tag{18.11}$$

Es sollte klargeworden sein, daß dieser zweite Weg deutlich einfacher ist.

Nun verbleibt noch die Bestimmung der nichttrivialen Lösung a'', b'', c'' von (18.9). Ausschreiben des Systems zeigt Invarianz unter $a'' \leftrightarrow a$, $b'' \leftrightarrow b$, $c'' \leftrightarrow c$, so daß $\Delta = \Delta' = \Delta''$ folgt. Es ist dann sinnvoll, auch a'', b'', c'' wie in (17.16) zu parametrisieren, mit gleichem λ aber unabhängigen ν'' (ρ spielt keine Rolle). Die erste Gleichung (18.9) lautet dann $aa'' - bb'' - a'c'' = 0$ oder

$$\begin{aligned}
0 &= \sinh \tfrac{2\lambda-(\lambda+\nu)}{2} \sinh \tfrac{2\lambda-(\lambda+\nu'')}{2} - \sinh \tfrac{\lambda+\nu}{2} \sinh \tfrac{\lambda+\nu''}{2} - \sinh \tfrac{\lambda-\nu'}{2} \sinh \lambda \\
&= \sinh^2 \lambda \cosh \tfrac{2\lambda+\nu+\nu''}{2} - \sinh \lambda \cosh \lambda \sinh \tfrac{2\lambda+\nu+\nu''}{2} - \sinh \tfrac{\lambda-\nu'}{2} \sinh \lambda \\
&= -\sinh \lambda \Big(\sinh \tfrac{\nu+\nu''}{2} + \sinh \tfrac{\lambda-\nu'}{2} \Big) \\
&= -2 \sinh \lambda \sinh \tfrac{\lambda+\nu-\nu'+\nu''}{4} \cosh \tfrac{\nu+\nu'+\nu''-\lambda}{4} \;.
\end{aligned}$$

Wegen $c = \rho \sinh \lambda \neq 0$ folgt

$$\sinh \frac{\lambda+\nu-\nu'+\nu''}{4} = 0 \;. \tag{18.12}$$

Es zeigt sich, daß die beiden anderen Gleichungen auf die gleiche Lösung führen. Da $\nu' \mapsto \nu' + 4k\pi\mathrm{i}$ nichts an a', b', c' ändert, können wir $\lambda + \nu - \nu' + \nu'' = 0$ annehmen. Führt man (als letzte Transformation) $v = \frac{1}{2}(\lambda + \nu)$ und analog für v', v'' ein, so ergibt sich die einfache Lösung

$$v' = v + v'' \tag{18.13}$$

für die Matrix-Elemente w'' von T.

18.2 Ausblick: Yang-Baxter-Gleichung

Wir geben nun eine äquivalente Formulierung von (18.7) an, die weitreichende Konsequenzen in der Mathematik hat. Sei wieder W der zweidimensionale Vektorraum mit Basis (e_+, e_-). Für führen lineare Abbildungen $R^i(v) : W^{\otimes N} \to W^{\otimes N}$ ein durch

$$(R^i(v))_{\underline{\alpha}\underline{\beta}} := \delta_{\alpha_1\beta_1} \cdots \delta_{\alpha_{i-1}\beta_{i-1}} w_{\alpha_i\alpha_{i+1}|\beta_i\beta_{i+1}}(v) \delta_{\alpha_{i+2}\beta_{i+2}} \cdots \delta_{\alpha_N\beta_N} \;. \tag{18.14}$$

Dabei ist $w = w(v)$, $w' = w(v')$ und $w'' = w(v'')$ mit $v + v'' = v'$. Die Kompatibilitätsbeziehung (18.7) lautet dann

$$\begin{aligned}
R^{i+1}(v) R^i(v+v'') R^{i+1}(v'') &= R^i(v'') R^{i+1}(v+v'') R^i(v) \;, \\
R^i(v) R^j(\tilde{v}) &= R^j(\tilde{v}) R^i(v) \text{ für } |i-j| \geq 2 \;.
\end{aligned} \tag{18.15}$$

Dabei kann für $\tilde{v}$ jeder der Parameter v, v', v'' gewählt werden. Die obere Gleichung (18.15) heißt *Yang-Baxter-Gleichung*. Jede nichttriviale Lösung dieser Gleichung, für allgemeine Wahl des Vektorraums W, definiert eine Transfermatrix für ein integrables (d.h. lösbares) Modell der Statistischen Physik.

Es gibt verschiedene Reformulierungen der Yang-Baxter-Gleichung. Schreibt man $R^i =: R^{i,i+1}$, so entsteht

$$R^{23}(v)R^{12}(v+v'')R^{23}(v'') = R^{12}(v'')R^{23}(v+v'')R^{12}(v) \ .$$

Führt man noch eine zusätzliche Permutation $P^{ij}(v_i \otimes v_j) = v_j \otimes v_i$ ein, dann erfüllt $\tilde{R}^{ij} := P^{ij}R^{ij}$ die Relation

$$\tilde{R}^{12}(v)\tilde{R}^{13}(v+v'')\tilde{R}^{23}(v'') = \tilde{R}^{23}(v'')\tilde{R}^{13}(v+v'')\tilde{R}^{12}(v) \ . \tag{18.16}$$

Dabei wirkt jetzt $\tilde{R}^{13}$ auf die äußeren Faktoren v_1, v_3 im Tensorprodukt $v_1 \otimes v_2 \otimes v_3$, während $\tilde{R}^{12}$ und $\tilde{R}^{23}$ auf Nachbarn wirken.

Oft unterdrückt man die Parameter v, v'' (d.h. setzt sie Null). Die Gleichung (18.15), für $v = v'' = 0$, liefert eine Darstellung der *Zopf-Gruppe* und stellt dadurch Verbindungen zur Knotentheorie dar. Die Gleichung (18.16) wird für das Koprodukt einer Hopf-Algebra gefordert und schränkt allgemeine Hopf-Algebren auf die interessantere Klasse der *quasi-triangulären Hopf-Algebren* ein. Im wesentlichen sind diese dasselbe wie *Quantengruppen*. Eine besonders einfache Lösung von (18.16) ist

$$\begin{aligned} &\tilde{R}(e_+ \otimes e_+) = e_+ \otimes e_+ \ , \qquad \tilde{R}(e_- \otimes e_-) = e_- \otimes e_- \ , \\ &\tilde{R}(e_+ \otimes e_-) = q(e_- \otimes e_+) \qquad \tilde{R}(e_- \otimes e_+) = q(e_+ \otimes e_-) + (1-q^2)(e_- \otimes e_+) \ . \end{aligned} \tag{18.17}$$

Solche q-Deformationen klassischer Relationen (hier der Vertauschung) sind typisch für Quantengruppen.

18.3 Konstruktion von Q

Zur Lösung des Eismodells über den algebraischen Zugang fehlt uns noch der Operator Q, der die Gleichung (17.24) erfüllt. Sei y eine Spalte von Q. Da V nach (18.1) ein Produkt von Vertexfaktoren $w_{\,.\,\alpha|\beta\,.}$ ist, erscheint es sinnvoll, auch die Spalten von Q als ein solches Produkt anzusetzen: $y_{\underline{\alpha}} = g^1_{\alpha_1} g^2_{\alpha_2} \cdots g^N_{\alpha_N}$. Dann folgt aus (18.1)

$$(Vy)_{\underline{\alpha}} = \sum_{\underline{\beta}} V_{\underline{\alpha}\underline{\beta}} y_\beta = \mathrm{tr}_W\big(G^1_{\alpha_1} G^2_{\alpha_2} \cdots G^N_{\alpha_N}\big) \ , \qquad (G^i_\alpha)_{\xi\xi'} := \sum_{\beta=\pm} w_{\xi\alpha|\beta\xi'} g^i_\beta \ ,$$

$$G^i_+ = \begin{pmatrix} a g^i_+ & 0 \\ c g^i_- & b g^i_+ \end{pmatrix} \ , \qquad G^i_- = \begin{pmatrix} b g^i_- & c g^i_+ \\ 0 & a g^i_- \end{pmatrix} \ . \tag{18.18}$$

Die Matrixdarstellung bezieht sich auf die Basis (e_+, e_-), z.B. $(G^i_+)_{-+} = \sum_{\beta=\pm} w_{-+|\beta+} g^i_\beta = c g^i_-$. Die Idee besteht nun darin, die Matrizen $G^i_\alpha = P^i H^i_\alpha (P^{i+1})^{-1}$ *simultan für beide Vorzeichen* $\alpha = \pm$ in obere Dreiecksmatrizen $H^i_\alpha = \begin{pmatrix} g^{i\prime}_\alpha & g^{i\prime\prime\prime}_\alpha \\ 0 & g^{i\prime\prime}_\alpha \end{pmatrix}$ zu transformieren (mit $P^{N+1} = P^1$). Falls das gelingt, folgt

$$(Vy)_{\underline{\alpha}} = \mathrm{tr}_W\big(H^1_{\alpha_1} H^2_{\alpha_2} \cdots H^N_{\alpha_N}\big) = \prod_{i=1}^N g^{i\prime}_{\alpha_i} + \prod_{i=1}^N g^{i\prime\prime}_{\alpha_i} \ . \tag{18.19}$$

Bezeichne $p^i \in W = \mathbb{C}^2$ die erste Spalte von P^i, so reduziert sich die erste Zeile der Gleichung $G^i_\alpha P^{i+1} = P^i H^i_\alpha$ auf

$$\sum_{\beta,\xi'} w_{\xi\alpha|\beta\xi'} g^i_\beta p^{i+1}_{\xi'} = p^i_\xi g^{i\prime}_\alpha \,. \tag{18.20}$$

Für jedes i sind das wegen (18.18) vier Gleichungen (entsprechend $\xi, \alpha = \pm 1$)

$$\begin{aligned} a g^i_+ p^{i+1}_+ &= p^i_+ g^{i\prime}_+ \,, & c g^i_- p^{i+1}_+ + b g^i_+ p^{i+1}_- &= p^i_- g^{i\prime}_+ \,, \\ b g^i_- p^{i+1}_+ + c g^i_+ p^{i+1}_- &= p^i_+ g^{i\prime}_- \,, & a g^i_- p^{i+1}_- &= p^i_- g^{i\prime}_- \,. \end{aligned} \tag{18.21}$$

Diese haben eine nichttriviale Lösung $(g^i_+, g^i_i, g^{i\prime}_+, g^{i\prime}_-)$, wenn die Determinante der entsprechenden 4×4-Matrix verschwindet. Diese Bedingung lautet

$$\Delta = \frac{1}{2}\Big(\frac{r^{i+1}}{r^i} + \frac{r^i}{r^{i+1}}\Big) \,, \qquad r^i := \frac{p^i_-}{p^i_+} \,, \qquad \Rightarrow \quad r^{i+1} = -r^i \exp(\pm\lambda) \,, \tag{18.22}$$

mit Δ gegeben durch (17.10). Somit folgt $r^i = (-1)^i r \exp(\lambda(\sigma^1 + \dots + \sigma^{i-i}))$ mit unabhängigen Vorzeichen $\sigma^i = \pm 1$ bis auf $\sum_{i=1}^N \sigma^i = 0$ wegen $r_{N+1} = r_1$ (außerdem muß N gerade sein). Da es auf globale Faktoren nicht ankommt, wählen wir $g^i_+ = p^i_+ = 1$ und $p^i_- = r^i$. Die Lösung von (18.21) ist nun mit (17.16)

$$\begin{aligned} g^i_+ &= 1 \,, & g^i_- &= r^i \, \frac{a + b e^{\sigma^i \lambda}}{c} = r^i e^{\frac{\lambda+\nu}{2}\sigma_i} \,, \\ g^{i\prime}_+ &= a \,, & g^{i\prime}_- &= \frac{a r^{i+1}}{r^i} g^i_i = -a r^i e^{\frac{3\lambda+\nu}{2}\sigma_i} \,. \end{aligned}$$

Die Lösung für $g^{i\prime\prime}_\alpha$ ergibt sich aus $\det(G^i_\alpha P^{i+1}) = \det(P^i H^i_\alpha)$. In dem vollständigen Produkt $\prod_{i=1}^N g^{i\prime\prime}_{\alpha_i}$ in (18.19) kürzen sich die $\det P^i$, so daß wir $\det P^i = 1$ annehmen dürfen. Insgesamt folgt

$$g^{i\prime\prime}_+ = b \,, \qquad\qquad g^{i\prime\prime}_- = -b r^i e^{\frac{\nu-\lambda}{2}\sigma_i} \,.$$

Somit ist gezeigt (als Vektoren in W):

$$\begin{aligned} g^i \equiv h^i(\nu) \,, \qquad g^{i\prime} &= a h^i(\nu + 2\lambda - 2\mathrm{i}\pi) \,, \qquad g^{i\prime\prime} = b h^i(\nu - 2\lambda + 2\mathrm{i}\pi) \,, \\ h^i(\nu) &:= \begin{pmatrix} 1 \\ r^i \exp(\frac{1}{2}(\lambda+\nu)\sigma^i) \end{pmatrix} \,. \end{aligned} \tag{18.23}$$

Fassen wir diese Vektoren wieder zusammen zu $y_{\underline{\beta}}(\nu) = h^1_{\beta_1}(\nu) \cdots h^N_{\beta_N}(\nu)$, so lautet die Gleichung (18.19)

$$V(\nu) y(\nu) = a^N y(\nu + 2\lambda - 2\pi\mathrm{i}) + b^N y(\nu - 2\lambda + 2\pi\mathrm{i}) \,. \tag{18.24}$$

Die Gleichung gilt unabhängig von der Wahl von σ_i und r. Bilden wir nun 2^N verschiedene solche Vektoren y durch Linearkombinationen von $\{y(\nu, r, \sigma)\}$, und schreiben wir diese Vektoren nebeneindander als Spalten einer Matrix $Q_R(\nu)$, so wird mit $a^N = \left(\rho \sinh \frac{\lambda-\nu}{2}\right)^N =: \phi(\lambda-\nu)$ und $b^N = \left(\rho \sinh \frac{\lambda+\nu}{2}\right)^N =: \phi(\lambda+\nu)$ exakt die Gleichung (17.24) für $Q \mapsto Q_R$ erhalten,

$$V(\nu)Q_R(\nu) = \phi(\lambda-\nu)Q_R(\nu+2\lambda-2\pi\mathrm{i}) + \phi(\lambda+\nu)Q_R(\nu-2\lambda+2\pi\mathrm{i}) \ . \tag{18.25}$$

Es ist plausibel, wenn auch nicht wirklich beweisbar (siehe Baxter), daß diese Matrix invertierbar gewählt werden kann.

Nun verbleibt noch, die Kommutativität von $Q(\nu)$ mit $Q(\nu'), V(\nu')$ zu erreichen. Dazu überlegt man sich, daß Vertauschen von a, b, also $\nu \mapsto -\nu$, in (18.18) einer Transposition entspricht: $V(-\nu) = V^t(\nu)$. Baut man aus den zugehörigen Lösungsvektoren $y(-\nu)$ die Matrix $Q_R(-\nu) =: Q_L^t(\nu)$, so entsteht durch Transponieren von (18.25) die Gleichung

$$Q_L(\nu)V(\nu) = \phi(\lambda+\nu)Q_L(\nu-2\lambda+2\pi\mathrm{i}) + \phi(\lambda-\nu)Q_L(\nu+2\lambda-2\pi\mathrm{i}) \ . \tag{18.26}$$

Eine explizite Rechnung (siehe Baxter) zeigt, daß das Skalarprodukt verschiedener y in folgendem Sinn symmetrisch ist:

$$\langle y(-\nu', r', \sigma'), y(\nu, r, \sigma)\rangle = \langle y(-\nu, r', \sigma'), y(\nu', r, \sigma)\rangle \ .$$

Das ist aber exakt die Kommutativität $Q_L(\nu')Q_R(\nu) = Q_L(\nu)Q_R(\nu')$. Wählt man nun ein ν_0 mit $\det Q_R(\nu_0) \neq 0$ und $\det Q_R(-\nu_0) \neq 0$, und definiert $Q(\nu) := Q_R(\nu)Q_R^{-1}(\nu_0)$, so folgt aus dieser Kommutativität für $\nu' \mapsto \nu_0$ zunächst $Q(\nu) = Q_L^{-1}(\nu_0)Q_L(\nu)$ und dann $Q(\nu')Q(\nu) = Q(\nu)Q(\nu')$. Schließlich ergibt Multiplikation von (18.25) von rechts mit $Q_R^{-1}(\nu_0)$ und von (18.26) von links mit $Q_L^{-1}(\nu_0)$ die Kommutativität $Q(\nu)V(\nu) = V(\nu)Q(\nu)$. Aus der simultanen Diagonalisierbarkeit folgt dann $Q(\nu)V(\nu') = V(\nu')Q(\nu)$.

Somit sind alle Eigenschaften der Matrizen V, Q in Definition 17.1 gezeigt (die Wachstumsbedingung iii) ist in der Lösung $h^i(\nu)$ nach (18.23) enthalten). Nach Zerlegung des Eigenwertproblems in Blöcke der Dimension $\frac{N}{n}$ (die entsprechende Diskussion haben wir unterdrückt), führt die algebraische Lösung auf das Eigenwertproblem (17.21)+(17.22), also

$$\frac{\sinh^N \frac{\lambda-\nu_j}{2}}{\sinh^N \frac{\lambda+\nu_j}{2}} = -\prod_{l=1}^{n} \frac{\sinh \frac{\nu_j-\nu_l-2\lambda+2\pi\mathrm{i}}{2}}{\sinh \frac{\nu_j-\nu_l+2\lambda-2\pi\mathrm{i}}{2}} \ . \tag{18.27}$$

Dessen Lösung über die Integralgleichung (17.14) zur Bestimmung des größten Eigenvektors ist natürlich dennoch notwendig. Die Koordinatentransformation (17.16) führt auf einige Vereinfachungen, die wir im folgenden Abschnitt kurz betrachten.

18.4 Bestimmung des Kontinuumsmaßes

Zur weiteren Behandlung von (18.27) sind reelle Parameter notwendig. Sei im folgenden $\Delta = -\cosh\lambda < -1$, also λ reell. Die Diskussion von $-1 < \Delta < 1$ ist analog, muß aber getrennt erfolgen. Für $\lambda \in \mathbb{R}$ erfordert der Ansatz $z_j \in S^1$ für die Lage des größten Eigenwertes, daß $\nu_j = -\mathrm{i}\alpha_j$ mit $\alpha_j \in [-\pi, \pi]$. Logarithmische Ableitung der entstehenden Gleichung $e^{\mathrm{i}k(\alpha)} = \frac{\sinh \frac{\lambda+\mathrm{i}\alpha}{2}}{\sinh \frac{\lambda-\mathrm{i}\alpha}{2}}$ liefert

$$\frac{dk(\alpha)}{d\alpha} = \frac{1}{2}\Big(\coth \frac{\lambda+\mathrm{i}\alpha}{2} + \coth \frac{\lambda-\mathrm{i}\alpha}{2}\Big) = \frac{\sinh\lambda}{\cosh\lambda - \cos\alpha} \,. \tag{18.28}$$

Somit ist $[-\pi, \pi] \ni \alpha \mapsto k(\alpha) \in [-\pi, \pi]$ monoton und im Inneren differenzierbar. Die Faktoren der rechten Seite von (18.27) werden zu

$$e^{-\mathrm{i}\Theta(\alpha,\beta)} = -\frac{\sinh \frac{2\lambda+\mathrm{i}(\beta-\alpha)}{2}}{\sinh \frac{2\lambda-\mathrm{i}(\beta-\alpha)}{2}} \quad\Rightarrow\quad \frac{d\Theta(\alpha,\beta)}{d\beta} = -\frac{\sinh(2\lambda)}{\cosh(2\lambda) - \cos(\beta-\alpha)} \,. \tag{18.29}$$

Nach Variablentransformation $\rho(k(\beta))dk'(\beta) = \frac{1}{2\pi}R(\beta)d\beta$ wird aus der oberen Integralgleichung in (17.14) die Gleichung

$$Nk(\alpha) = -\pi(n+1) + N\int_{-\pi}^{\alpha} d\beta\; R(\beta) - \frac{N}{2\pi}\int_{-\pi}^{\pi} d\beta\; R(\beta)\Theta(\alpha,\beta) \,. \tag{18.30}$$

Aus dieser entsteht durch Ableitung nach α unter Verwendung von (18.28) und (18.29) die Gleichung

$$R(\alpha) = \frac{\sinh\lambda}{\cosh\lambda - \cos\alpha} - \frac{1}{2\pi}\int_{-\pi}^{\pi} d\beta\; R(\beta)\frac{\sinh(2\lambda)}{\cosh(2\lambda) - \cos(\beta-\alpha)} \tag{18.31}$$

mit Nebenbedingung

$$\frac{n}{N} = \frac{1}{2\pi}\int_{-\pi}^{\pi} d\beta\; R(\beta) \,. \tag{18.32}$$

Fourier-Transformation

$$\hat{R}_m := \frac{1}{2\pi}\int_{-\pi}^{\pi} d\beta\; R(\beta)e^{\mathrm{i}m\beta} \qquad\Leftrightarrow\qquad R(\beta) = \sum_{m=-\infty}^{\infty} \hat{R}_m e^{-\mathrm{i}m\beta} \,, \tag{18.33}$$

mit $m \in \mathbb{Z}$, führt auf

$$\begin{aligned}\hat{R}_m &= \frac{1}{2\pi}\int_{-\pi}^{\pi} d\alpha \frac{e^{\mathrm{i}m\alpha}\sinh\lambda}{\cosh\lambda - \cos\alpha} \\ &\quad - \frac{1}{(2\pi)^2}\sum_{l=-\infty}^{\infty}\int_{-\pi}^{\pi} d\beta \int_{-\pi}^{\pi} d\alpha\; \hat{R}_l \frac{e^{\mathrm{i}(m(\alpha-\beta)+(l-m)\beta}\sinh(2\lambda)}{\cosh(2\lambda) - \cos(\beta-\alpha)} \,.\end{aligned} \tag{18.34}$$

Nach Verschiebung $\alpha \mapsto \alpha' = \alpha+\beta$ entsteht ein Integral über $\alpha' \in [-\pi+\beta, \pi+\beta]$. Für $\beta > 0$ liefert das Teilintegral über $[\pi, \pi+\beta]$ den gleichen Wert wie das Integral über $[-\pi, -\pi+\beta]$, so daß wir α' über $[-\pi, \pi]$ oder $[0, 2\pi]$ integrieren können (ebenso für $\beta < 0$). Das verbleibende β-Integral ergibt $2\pi\delta_{ml}$. Residuensatz oder Gradstein-Ryshik §3.613.1 liefern

$$\frac{1}{2\pi}\int_0^{2\pi} d\alpha\, \frac{\cos(m\alpha)\sinh\lambda}{\cosh\lambda - \cos\alpha} = e^{-|m|\lambda} ,$$

so daß im Endergebnis

$$\hat{R}_m = \frac{1}{2\cosh(\lambda m)} \tag{18.35}$$

entsteht. Die Nebenbedingung für den Sektor n zum größten Eigenwert (aus der Bedingung $|z_i| = 1$) lautet einfach $\frac{n}{N} = \hat{R}_0 = \frac{1}{2}$.

Schließlich verbleibt in (17.6) die Transformation

$$\begin{aligned} L(e^{\mathrm{i}k(\alpha)}) &= \frac{b\sinh\frac{\lambda-\mathrm{i}\alpha}{2} + 2b\cosh\lambda\sinh\frac{\lambda+\mathrm{i}\alpha}{2} + a\sinh\frac{\lambda+\mathrm{i}\alpha}{2}}{a\sinh\frac{\lambda-\mathrm{i}\alpha}{2} - b\sinh\frac{\lambda+\mathrm{i}\alpha}{2}} \\ &= \frac{\sinh\lambda\sinh\frac{2\lambda+\nu+\mathrm{i}\alpha}{2}}{\frac{1}{2}(\cosh\frac{2\lambda-\nu-\mathrm{i}\alpha}{2} - \cosh\frac{2\lambda+\nu+\mathrm{i}\alpha}{2})} = -\frac{\sinh\frac{2\lambda+\nu+\mathrm{i}\alpha}{2}}{\sinh\frac{\nu+\mathrm{i}\alpha}{2}} \end{aligned}$$

und somit (nach analoger Rechnung für M)

$$L(e^{\mathrm{i}k(\alpha)}) = \frac{e^{\lambda+\nu} - e^{-\lambda-\mathrm{i}\alpha}}{e^{-\mathrm{i}\alpha} - e^{\nu}} , \qquad M(e^{\mathrm{i}k(\alpha)}) = \frac{e^{\nu-\lambda} - e^{\lambda-\mathrm{i}\alpha}}{e^{-\mathrm{i}\alpha} - e^{\nu}} . \tag{18.36}$$

In der freien Energiedichte (17.15) benötigen wir die Logarithmen dieser Funktionen. Für $\nu < 0$, also $a > b$, ist $\epsilon_1 < \epsilon_3$, so daß wir (zumindest für kleine T) die Entwicklung von $\ln L$ benötigen:

$$\ln L(e^{\mathrm{i}k(\alpha)}) = \lambda + \nu + \mathrm{i}\alpha - \sum_{m=1}^{\infty} \frac{e^{-m\lambda}}{m}\big(e^{-m(\lambda+\nu+\mathrm{i}\alpha)} - e^{m(\lambda+\nu+\mathrm{i}\alpha)}\big) \tag{18.37}$$

Mit (18.35) folgt

$$\begin{aligned} f\big|_{\nu<0} &= \epsilon_1 - \frac{T}{2\pi}\int_{-\pi}^{\pi} d\alpha\; R(\alpha)\ln L(e^{\mathrm{i}k(\alpha)}) \\ &= \epsilon_1 - T\Big(\frac{\lambda+\nu}{2} + \sum_{m=1}^{\infty}\frac{e^{-m\lambda}\sinh(m(\lambda+\nu))}{m\cosh(m\lambda)}\Big) . \end{aligned} \tag{18.38}$$

Analog ergibt sich (tatsächlich sind beide Ergebnisse wegen $\sinh(m(\lambda+\nu)) = \sinh(m(\lambda-\nu)) + 2\cosh(m\lambda)\sinh(m\nu)$ identisch)

$$f\big|_{\nu>0} = \epsilon_3 - T\Big(\frac{\lambda-\nu}{2} + \sum_{m=1}^{\infty}\frac{e^{-m\lambda}\sinh(m(\lambda-\nu))}{m\cosh(m\lambda)}\Big) . \tag{18.39}$$

In völliger Analogie findet man für $-1 < \Delta = -\cos(\lambda) < 1$

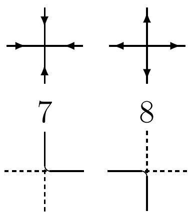
$$\begin{aligned} f &= \epsilon_1 - T \int_{-\infty}^{\infty} dx \, \frac{\sinh((\pi-\lambda)x)\sinh((\lambda+\nu)x)}{2x\sinh(\pi x)\cosh(\lambda x)} \\ &= \epsilon_3 - T \int_{-\infty}^{\infty} dx \, \frac{\sinh((\pi-\lambda)x)\sinh((\lambda-\nu)x)}{2x\sinh(\pi x)\cosh(\lambda x)} \,, \end{aligned} \tag{18.40}$$

siehe Baxter, Kapitel 8.8. Im Spezialfall $\epsilon_i = 0$, also $a = b = c = 1$, $\nu = 0$ und $\mu = \frac{2\pi}{3}$ ergibt sich das von Lieb bewiesene Resultat $f = -\frac{3T}{2}\ln\frac{4}{3}$.

Phasenübergänge finden bei $\Delta = -1$, also $\lambda = \nu = 0$ statt, da die Transformation (17.16) dort singulär wird. Das genaue Verhalten und die kritischen Exponenten hängen empfindlich von den gegenseitigen Beziehungen $\epsilon_1, \epsilon_3, \epsilon_5$ ab. Genaueres wird in Baxter, Kapitel 8.10+8.11, diskutiert.

18.5 Ausblick: 8-Vertex-Modell

Diese algebraischen Methoden wurden mit Erfolg zur Konstruktion weiter Modelle genutzt. Ein wichtiges Beispiel ist das 8-Vertex-Modell, das zusätzlich zu (17.1) zwei weitere Vertices (Quelle und Senke) hat mit Boltzmann-Faktor $d = e^{-\frac{\epsilon_4}{T}}$:



Alle Schritte lassen sich (mit größerem Aufwand!) übertragen. An Stelle von (17.10) hat man zwei Diskriminanten $\Delta = \frac{a^2+b^2-c^2-d^2}{2(ab+cd)}$ und $\Gamma = \frac{ab-cd}{ab+cd}$. Dadurch sind die hyperbolischen Funktionen durch Jacobische elliptische Funktionen zu ersetzen. Einzelheiten finden sich in Baxter, Kapitel 10.

Teil III
Die Renormierungsgruppe

19 Skalenhypothese und Blockspins

19.1 Skalenhypothese (Widom)

Definition 19.1 Eine Funktion f von zwei Variablen heißt *verallgemeinerte homogene Funktion*, falls $f(\lambda^a x, \lambda^b y) = \lambda f(x, y)$.

Mit $\lambda = y^{-\frac{1}{b}}$ folgt $f(x, y) = y^{\frac{1}{b}} f(\frac{x}{y^{\frac{a}{b}}}, 1)$, d.h. f hängt nur von einer Kombination der Variablen x, y ab.

Die *Skalenhypothese* (Widom, 1965) besteht in der Annahme, daß der nichtanalytische Teil der freien Energiedichte $f = \frac{F}{\mathcal{N} \cdot N}$ in der Nähe des kritischen Punktes eine verallgemeinerte homogene Funktion ist.

Für das Isingmodell sind die Parameter gegeben durch reduzierte Temperatur $x \mapsto \tau = \frac{T - T_c}{T}$ und Magnetfeld $y \mapsto h > 0$:

$$f = h^{\frac{1}{b}} f(\tfrac{\tau}{h^{\frac{a}{b}}}, 1) = \tau^{\frac{1}{a}} f(1, \tfrac{h}{\tau^{\frac{b}{a}}}) \; . \tag{19.1}$$

Im Prinzip darf f für positive/negative τ, h verschieden sein; zur Vereinfachung der Diskussion ignorieren wir diese Möglichkeit. Nach (12.10) gilt

$$\begin{aligned} m = -\frac{\partial f}{\partial h} &= h^{\frac{1}{b}-1} \cdot \Big(-\frac{1}{b} f(\tfrac{\tau}{h^{\frac{a}{b}}}, 1) + \frac{a}{b} \frac{\tau}{h^{\frac{a}{b}}} \partial_x f(\tfrac{\tau}{h^{\frac{a}{b}}}, 1) \Big) \\ &= \tau^{\frac{1-b}{a}} \big(-\partial_y f(1, \tfrac{h}{\tau^{\frac{b}{a}}}) \big) \; . \end{aligned} \tag{19.2}$$

Ist $\tau = 0$ und $h \neq 0$, so darf die obere Gleichung verwendet werden, während für $\tau \neq 0$ und $h = 0$ die untere Gleichung genommen werden muß. Durch Vergleich mit (12.12) lesen wir ab:

$$\beta = \frac{1-b}{a} \; , \qquad\qquad \delta = \frac{b}{1-b} \; . \tag{19.3}$$

Die nochmalige Ableitung der unteren Gleichung liefert

$$\chi = -\frac{\partial^2 f}{\partial h^2} = \tau^{-\frac{2b-1}{a}} \big(-\partial_y^2 f(1, \tfrac{h}{\tau^{\frac{b}{a}}}) \big) \qquad \Rightarrow \qquad \gamma = \frac{2b-1}{a} = \beta(\delta - 1) \; . \tag{19.4}$$

Die Skalenrelation $\gamma = \beta(\delta - 1)$ hatten wir bereits in (15.39) erwähnt. Schließlich erhalten wir für die spezifische Wärme

$$\begin{aligned} c = -\frac{\tau+1}{T_c} \frac{\partial^2 f}{\partial \tau^2} &= \tau^{-(2-\frac{1}{a})} \Big(\frac{\tau+1}{T_c a^2} \Big((a-1) f(1, \tfrac{h}{\tau^{\frac{b}{a}}}) \\ &\quad + (1-b-a) \frac{bh}{\tau^{\frac{b}{a}}} \partial_y f(1, \tfrac{h}{\tau^{\frac{b}{a}}}) + \Big(\frac{bh}{\tau^{\frac{b}{a}}} \Big)^2 \partial_y^2 f(1, \tfrac{h}{\tau^{\frac{b}{a}}}) \Big) \; . \end{aligned} \tag{19.5}$$

Für $h = 0$ folgt durch Vergleich mit (12.12):

$$\alpha = 2 - \frac{1}{a} \qquad \Rightarrow \qquad \alpha + 2\beta + \gamma = 2\ . \tag{19.6}$$

Damit ist in der Rushbrooke-Ungleichung (12.18) die Gleichheit realisiert.

19.2 Blockspins (Kadanoff)

Die Gleichungen $\alpha + 2\beta + \gamma = 2$ und $\gamma = \beta(\delta - 1)$ sind in allen wichtigen Modellen und auch experimentell erfüllt, so daß wir von der Korrektheit der Skalenhypothese ausgehen können. Eine tiefere Begründung wurde erstmals von Kadanoff (1966) gegeben. Ausgangspunkt ist die Annahme, daß am kritischen Punkt die Korrelationslänge divergiert (was wir später noch genauer diskutieren). Deshalb ist das Verhalten des Systems bei kurzen Abständen irrelevant und kann durch eine Mittelung ersetzt werden.

Sei das System auf einem Gitter der Weite a definiert. Kadanoffs Idee besteht darin, die Spins σ_j in einem Würfel J der Kantenlänge La zu einem Blockspin zusammenzufassen. Oft nimmt man das Vorzeichen des Gesamtspins innerhalb J. Eine Wahl, die später in der Quantenfeldtheorie verallgemeinert wird, ist

$$S_j := \frac{1}{Z} \sum_{j \in J} \sigma_j\ . \tag{19.7}$$

Der Faktor $\frac{1}{Z}$ ist eine *Renormierung*, die sicherstellt, daß im Limes $L \to \infty$ (bzw. einer unendlichen Iteration des Verfahrens) der Blockspin weder unendlich noch identisch 0 wird. Sind alle σ_j parallel, so folgt $Z = L^D$. Wegen der thermischen Fluktuation erwarten wir aber einen kleineren Wert $Z = L^y$ mit $0 < y < D$. Damit nimmt der Blockspin die Werte $-\frac{L^D}{L^y}, -\frac{L^D+2}{L^y}, \dots, \frac{L^D}{L^y}$ an. Die Vielfachheiten berücksichtigen wir in einem Faktor $e^{\mu(S_J)}$. Ist $H(\sigma)$ der ursprüngliche Hamilton-Operator (der Temperatur und Magnetfeld als Parameter enthält), dann kann die Zustandssumme partiell summiert werden in eine Summe über Blockspins:

$$\begin{aligned}
\mathcal{Z} &= \sum_{\sigma_1,\dots,\sigma_{N^D}=\pm 1} e^{-H(\sigma)} =: \sum_{S_1,\dots,S_{N^D} \in [-L^{D-y}, L^{D-y}]} e^{-\tilde{H}(S)}\ , \qquad (19.8)\\
e^{-\tilde{H}'(S)} &= \sum_{\sigma_1,\dots,\sigma_{N^D}=\pm 1} e^{\mu(S,\sigma)-H(\sigma)} \quad \text{mit} \sum_{S_1,\dots,S_{N^D} \in [-L^{D-y}, L^{D-y}]} e^{\mu(S,\sigma)} = 1 \ \ \forall \sigma\ .
\end{aligned}$$

Der neue Blockspin-Hamilton-Operator $\tilde{H}'$ wird im allgemeinen sehr kompliziert sein. Man ersetzt $\tilde{H}'$ deshalb durch einen anderen Operator $\tilde{H}$, der sich einerseits möglichst wenig von $\tilde{H}'$ unterscheidet und andererseits die Summe über S_J berechenbar macht. Im einfachsten Fall nimmt man für $\tilde{H}$ dieselbe Form an wie für $H(\sigma, \tau, h)$, nur mit σ ersetzt durch S und $\tau \mapsto \tilde{\tau}$ und $h \mapsto \tilde{h}$. Außer in speziellen $D = 1$-dimensionalen Modellen ist das eine sehr grobe Näherung, so daß man keine quantitative Übereinstimmung erwarten darf. Qualitativ sind die Ergebnisse jedoch erstaunlich gut. Die Begründung wird später gegeben; im wesentlichen läuft es darauf hinaus, daß der ursprüngliche Hamilton-Operator H nur dann ein sinnvolles Modell beschreibt, wenn $H \mapsto \tilde{H}$ die Form behält.

Da das Magnetfeld h an den Gesamtspin $\sum_i \sigma_i$ koppelt, der in $\tilde{H}$ durch $\sum_J S_J$ ersetzt wird, müssen wir $\tilde{h} = Zh = L^y h$ setzen. Für die reduzierte Temperatur kann man i.a. keine funktionelle Abhängigkeit beweisen, so daß wir einfach $\tilde{\tau} = L^x \tau$ *annehmen*. Letztlich ist diese Annahme nichts anderes als die Skalenhypothese. Aus $\mathcal{Z}_{N^D}(\tau, h) \approx \mathcal{Z}_{(N/L)^D}(\tilde{\tau}, \tilde{h})$ folgt dann für die freie Energiedichte

$$\begin{aligned} f(L^x\tau, L^y h) = f(\tilde{\tau}, \tilde{h}) &= \frac{1}{(N/L)^D} \ln \mathcal{Z}_{(N/L)^D}(\tilde{\tau}, \tilde{h}) \\ &= L^D \frac{1}{N^D} \ln \mathcal{Z}_{N^D}(\tau, h) = L^D f(\tau, h) \;. \end{aligned} \tag{19.9}$$

Mit der Ersetzung $L^D = \lambda$ und $x = aD$, $y = bD$ ist das exakt die Skalenhypothese (19.1)!

19.3 Beispiel: $D = 1$-Isingmodell

Wir gehen zurück zur Transfermatrix (13.3) des eindimensionen Isingmodells. An Stelle von h, T, J führen wir $K = \frac{J}{T}$ und $b = \frac{h}{T}$ ein. Wir hatten gesehen:

$$\mathcal{Z}_N(K, b) = \mathrm{tr}(V^N(K, b)) \;, \qquad V(K, b) = \begin{pmatrix} e^{K+b} & e^{-K} \\ e^{-K} & e^{K-b} \end{pmatrix} \;. \tag{19.10}$$

Die Idee der Renormierungsgruppe besteht darin, die Zustandssumme in Teilschritten auszurechnen. Wir fassen die Spins σ_{2n-1} und σ_{2n} zu einem Blockspin zusammen (d.h. $L = 2$) und summieren über alle geraden Gitterpunkte. Offenbar ist das nichts anderes als die Bildung von V^2. Für 2×2-Matrizen ist nun leicht nachzurechnen, daß

$$(V(K, b))^2 = e^{2g(K,b)} V\big((K'(K, b), b'(K, b)\big) \tag{19.11}$$

für geeignete Funktionen $K'(K, b)$, $b'(K, b)$ und $g(K, b)$. Das ist bereits die Transformation $H \mapsto \tilde{H}$. Explizit findet man

$$\begin{aligned} 2e^b \cosh(2K + b) = e^{2g} e^{K'+b'} \;, \qquad & 2e^{-b} \cosh(2K - b) = e^{2g} e^{K'-b'} \;, \\ 2\cosh(b) = e^{2g} e^{-K'} & \end{aligned} \tag{19.12}$$

mit der Lösung

$$\begin{aligned} K' &= \frac{1}{4} \ln \Big(\frac{\cosh(2K + b) \cosh(2K - b)}{\cosh^2 b} \Big) \;, \\ b' &= b + \frac{1}{2} \ln \Big(\frac{\cosh(2K + b)}{\cosh(2K - b)} \Big) \;, \\ g &= \frac{1}{8} \ln \Big(16 \cosh(2K + b) \cosh(2K - b) \cosh^2 b \Big) \;. \end{aligned} \tag{19.13}$$

Diese Ausintegration läßt sich wiederholen und führt auf ein Ising-Modell der viertel Größe, usw:

$$(K,b) \xrightarrow{\mathcal{R}_2} (K',b') \xrightarrow{\mathcal{R}_2} (K'',b'') \xrightarrow{\mathcal{R}_2} \dots \qquad (19.14)$$

Der auf diese Weise entstehende Fluß im Parameteraum (K,b), bzw. im Raum physikalischer Modelle, heißt *Renormierungsgruppenfluß* ode kurz RG-Fluß. Weiter ist klar, daß (K'',b'') auch direkt aus dem Vergleich von V^4 mit V zu erhalten wäre, $(K,b) \xrightarrow{\mathcal{R}_4} (K'',b'')$. Mit anderen Worten, die Transformationen $\{\mathcal{R}_L \ : \ L \in \mathbb{N}\}$ bilden eine Halbgruppe

$$\mathcal{R}_L \circ \mathcal{R}_{L'} = \mathcal{R}_{LL'} \ . \qquad (19.15)$$

die *Renormierungsgruppe* genannt wird. Es ist keine Gruppe, da sich das Ausintegrieren nicht rückgängig machen läßt.

Die Renormierungsgruppe enthält schon die wesentlichen Informationen über kritische Phänomene: Wir werden später sehen, daß kritische Punkte gerade solche sind, an denen das Modell selbstähnlich wird. Mit anderen Worten, es sind genau die Fixpunkte $(K_\star, b_\star)$ der RG-Transformation $(K,b) \mapsto (K',b')$. Im 1D-Isingmodell findet man, daß die stabilen Fixpunkte gegeben sind durch die Gerade $K_\star = 0$, d.h. $T = \infty$, und b beliebig. Daneben gibt es den instabilen Fixpunkt $K_\star = \infty$ bzw. $T = 0$. Die einzige Kritizität bei $T = \infty$ ergibt sich auch aus der exakten Rechnung. Zu beachten ist aber, daß die Diagonalisierung von V nur deshalb gelang, weil es nur um 2×2-Matrizen ging. Der entsprechende Schritt $H \mapsto \tilde{H}$ kann im allmeinen nur näherungsweise durchgeführt werden, dann aber auch für Modelle, die nicht exakt lösbar sind.

Durch die Renormierungsgruppe können wir das $D = 1$-Isingmodell am kritischen Punkt direkt lösen:

$$\begin{aligned} \frac{\ln \mathcal{Z}_N(K,b)}{N} &= g(K,b) + \frac{1}{2} \frac{\ln \mathcal{Z}_{\frac{N}{2}}(K',b')}{\frac{N}{2}} \ , \\ \stackrel{N\to\infty}{\Longrightarrow} \qquad f(K,b) &= -Tg(K,b) + \frac{1}{2} f(K',b') \ . \end{aligned} \qquad (19.16)$$

Insbesondere ist $f(K_\star, b) = -2Tg(K_\star, b)$. Näherungsweise gelingt das auch in höheren Dimensionen.

19.4 Renormierungsgruppentransformation (Wilson)

Das Prinzip der schrittweisen Ausintegration der Freiheitsgrade kommt vor allem in Modellen der der Quantenfeldtheorie zur Anwendung. In Modellen der Statistischen Physik kombiniert man die Ausintegration mit weiteren Schritten, die wieder auf den gleichen Satz von Freiheitsgraden zurückführen. Diese Methode geht im wesentlichen auf Wilson zurück. Der entscheidende Vorteil ist, daß auf diese Weise eine Transformation in einem *Vektorraum der Kopplungskonstanten* entsteht. Zwar ist dieser unendlich-dimensional, aber wichtige Eigeschaften lassen sich mit Standardmethoden der linearen Algeba erhalten. Die Transformation besteht aus folgenden Schritten:

Definition 19.2 (Wilson) Gegeben ein System für N^D Spins σ_j. Die Renormierungsgruppentransformation ist die Hintereinanderausführung folgender Schritte:

i) Vervielfachung des Systems auf $\tilde{N}^D := (LN)^D$ Spins $\sigma_1, \dots, \sigma_{(LN)^D}$. Für N genügend groß kann die Änderung der freien Energiedichte vernachlässigt werden.

ii) Blockspin-Transformation z.B. $\sigma_j \mapsto S'_J = \sum_{j \in J} \sigma_j$, $J = 1, \dots, N$.

iii) Renormierung $S_J = L^{-y} S'_J$.

iv) Dezimierung der Freiheitsgrade

$$\Big(\sum_{\sigma_1,\dots,\sigma_{N^D}} e^{-H_{N^D}(\sigma)} \Big)^{L^D} = (\mathcal{Z}_{N^D})^{L^D} \approx \mathcal{Z}_{\tilde{N}^D} = \sum_{\sigma_1,\dots,\sigma_{\tilde{N}^D}} e^{-H_{\tilde{N}^D}(\sigma)}$$
$$= \sum_{S_1,\dots,S_{N^D}} \sum_{\sigma} e^{-H_{\tilde{N}^D}(S,\sigma)} = \sum_{S_1,\dots,S_{N^D}} e^{-\tilde{H}_{N^D}(S)} . \tag{19.17}$$

Dabei ist $H_{\tilde{N}^D}(S,\sigma) = -\mu(S,\sigma) + H_{\tilde{N}^D}(\sigma)$ mit $\sum_{S_1,\dots,S_{N^D}} e^{\mu(S,\sigma)} = 1$.

v) Stauchen aller Längen $\ell \mapsto \tilde{\ell} := \frac{\ell}{L}$, so daß das System auf die ursprüngliche Größe schrumpft.

vi) Umbenennung $S_J \mapsto \sigma_j$ mit $j = J = 1, \dots, N^D$.

Auf diese Weise erhalten wir eine Transformation $H_{N^D}(\sigma) \mapsto \tilde{H}_{N^D}(\sigma)$ von Hamilton-Operatoren *für dasselbe* Spin-System $\sigma_1, \dots, \sigma_{N^D}$. Sinnvollerweise parametrisiert man alle möglichen, mit der Symmetrie verträglichen, Hamilton-Operatoren durch Kopplungskonstanten K_r. Neben dem K des Isingmodells für die Wechselwirkung nächster Nachbarn addiert man Beiträge für die Wechselwirkung übernächster Nachbarn, 4-Spin-Wechselwirlungen, usw. Dadurch kann man $H_{N^D}(\sigma) \mapsto \tilde{H}_{N^D}(\sigma)$ als Transformation $\tilde{K} = \mathcal{R}_L(K)$ auffassen.

19.5 Die Korrelationslänge

Die Korrelationslänge ξ charkterisiert den exponentiellen Abfall (12.14) der Spin-Spin-Korrlation $\langle \sigma_j \sigma_k \rangle_c \simeq \frac{e^{-\frac{|j-k|}{\xi}}}{|j-k|^{D-2}}$, *gemessen in Gittereinheiten.* Bei der Zusammenfassung von je L^D Spins zu einem Blockspin verringert sich die Korrelationslänge entsprechend $\xi \mapsto \frac{1}{L}\xi$. Da die Korrelationslänge durch die Kopplungskonstanten K bestimmt ist, schreiben wir

$$\xi(\mathcal{R}_L(K)) = \frac{1}{L}\xi(K) \; . \tag{19.18}$$

Diese simple Gleichung hat eine wichtige

Folgerung 19.3 *Fixpunkte $K_\star = \mathcal{R}_L(K_\star)$ der RG-Transformation entsprechen divergierender Korrelationslänge $\xi \to \infty$.*

Es ist nun naheliegend, diese Divergenzen der Korrelationslänge mit dem kritischen Verhalten anderer Größen (spezifischen Wärme, magnetische Suszeptibilität) in Verbindung zu setzen. Tatsächlich bestätigt auch das Experiment eine große Reichweite der Korrelationen in der Nähe des kritischen Punktes.

Schreiben wir abkürzend $\xi(\mathcal{R}_L(K)) =: \tilde{\xi}$, so zeigt der Vergleich von $\frac{1}{L} = \frac{\tilde{\xi}}{\xi}$ mit der Relation $\frac{\tilde{\tau}}{\tau} = (\frac{1}{L})^{-x}$ aus (19.9), daß wir $\xi \sim \tau^{-\frac{1}{x}}$ erwarten. Aus der Definition (12.15) des kritischen Exponenten ν lesen wir $\nu = \frac{1}{x}$ ab, und mit $x = aD$ aus (19.9) folgt

$$D\nu = \frac{1}{a} = \gamma + 2\beta = 2 - \alpha \; . \tag{19.19}$$

Direkt an der kritischen Temperatur $\tau = 0$, also divergenter Korrelationslänge, war die Spin-Spin-Korrelation gegeben durch $\langle \sigma_j \sigma_k \rangle_c \simeq \frac{1}{|j-k|^{D-2+\eta}}$, *wieder gemessen in Gittereinheiten.* Aus dem Vergleich der Definition (12.13) der Spin-Spin-Korrelation mit der magnetisischen *Gesamt*-Suszeptibilität (12.11) folgt

$$\chi_{N^D} = \sum_{j,k} \langle \sigma_j \sigma_k \rangle_c = N^D \sum_k \langle \sigma_0 \sigma_k \rangle_c \; ,$$

wobei im zweiten Schritt die Translationsinvarianz ausgenutzt wurde. Somit gilt für die Dichte der Suszeptibilität *pro Gitterplatz* $\chi = \sum_k \langle \sigma_0 \sigma_k \rangle_c$. Diese Summe kann auf $|k| < \xi$ beschränkt werden, da jenseits der Korrelationslänge die Beiträge exponentiell abfallen:

$$\chi = \sum_{|k|<\xi} \langle \sigma_0 \sigma_k \rangle_c \sim \sum_{|k|<\xi} \frac{1}{k^{D-2+\eta}} \approx \int_0^\xi \frac{k^{D-1} dk}{k^{D-2+\eta}} \sim \xi^{2-\eta} \; . \tag{19.20}$$

Setzen wir $\chi \sim \tau^{-\gamma}$ und $\xi \sim \tau^{-\nu}$ ein, so folgt als letzte Relation

$$\gamma = (2 - \eta)\nu \; . \tag{19.21}$$

20 Linearisierung in der Nähe des kritischen Punktes

20.1 Klassifizierung der Kopplungen

Sei X der Vektorraum der Kopplungskonstanten eines Modells und $\mathcal{R}_L : X \to X$ die RG-Transformation. Angenommen, diese habe in $K_\star = \mathcal{R}_L(K_\star)$ einen Fixpunkt. Dann gilt in der Nähe dieses Punktes

$$\mathcal{R}_L(K) - \mathcal{R}_L(K_\star) = \mathrm{D}\mathcal{R}_L \circ (K - K_\star) \ , \tag{20.1}$$

wobei $\mathrm{D}\mathcal{R}_L : X \to X$ das totale Differential (Jacobi-Matrix) ist. Wir nehmen an, daß das Eigenwertproblem $\mathrm{D}\mathcal{R}_L(e_i) = \rho_i^{(L)} e_i$ lösbar ist. Hintereinanderausführung mehrer RG-Transformationen führt wegen $\mathcal{R}_L \mathcal{R}_{L'} = \mathcal{R}_{LL'}$ auf $\rho_i^{(L)} \rho_i^{(L')} = \rho_i^{(LL')}$ mit Lösung $\rho_i^{(L)} = L^{y_i}$. Verschieben wir noch in $K_\star = 0$, so entsteht insgesamt

$$\mathcal{R}_L(e_i) = L^{y_i} e_i \ , \qquad L \frac{d}{dL} \mathcal{R}_L(e_i) = y_i e_i \ . \tag{20.2}$$

Die folgende Definition erweist sich als wichtig:

Definition 20.1 Eigenvektoren e_i des linearisierten RG-Operators $\mathrm{D}\mathcal{R}$ im Vektorraum der Kopplungskonstanten eines Modells heißen

- relevant, falls $y_i > 0$,
- marginal, falls $y_i = 0$,
- irrelevant, falls $y_i < 0$.

Für alle irrelvanten Eigenvektoren folgt $\lim_{L\to\infty} \mathcal{R}_L(e_i) = 0$, d.h. der (typischerweise unendlich-dimensionale) Unterraum der irrelevanten Kopplungen wird unter der RG-Transformation in den kritischen Punkt $K_\star = 0$ geschickt. Die Urbilder von $K_\star = 0$ unter der RG-Transformation bilden die *kritische Mannigfaltigkeit* $M_\star \subseteq X$. Sie ist dadurch charakterisiert, daß die relevanten und marginalen Kopplungen identisch Null sind. Typischerweise hat die kritische Mannigfaltigkeit *endliche Kodimension*. Diese endlich vielen Parameter, also *die Werte* e_j *der relevanten und marginalen Kopplungen, charakterisieren somit das System vollständig in der Nähe des kritischen Punktes*. Dadurch wird erklärt, daß das System am kritischen Punkt durch nur wenige Parameter beschrieben wird (Universalität). In Spin-Systemen sind diese relevanten Kopplungen gerade die Kopplung nächster Nachbarn und der Gesamtspin, und diese kodieren reduzierte Temperatur und Magnetfeld. Obwohl die RG-Transformation zunächst einen komplizierten effektiven Hamilton-Operator generiert, dürfen wir gefahrlos alles wegprojizieren, was nicht die gleiche Form wie der Anfangs-Hamilton-Operator hat. Dabei ist natürlich zu beweisen, daß man zu Beginn alle relevanten/marginalen Kopplungen berücksichtigt hat! Aber insgesamt wird verständlich, weshalb makroskopische Systeme aus 10^{23} Freiheitsgraden so gut durch sehr wenige Parameter wie Druck und Temperatur beschrieben werden.

Beispiel: $D = 2$ **Isingmodell**

Sehen wir uns das 2D-Isingmodell bei $h \neq 0$ an und integrieren wie für $D = 1$ über die Hälfte der Freiheitsgrade ohne Blockspin-Bildung. Wie für $D = 1$ ist $K = \frac{J}{T}$ und $b = \frac{h}{T}$. Wir fassen das quadratische Gitter als toroidales Schachbrett auf und summieren über die weißen Felder. Sei σ_5 weiß und $\sigma_1, \sigma_2, \sigma_3, \sigma_4$ die schwarzen Nachbarn. Der zu σ_5 beitragende Ausschnitt der Zustandssumme ist

$$\begin{aligned}&\sum_{\sigma_5=\pm 1} e^{K\sigma_5(\sigma_1+\sigma_2+\sigma_3+\sigma_4)+b(\sigma_5+\frac{1}{4}(\sigma_1+\sigma_2+\sigma_3+\sigma_4))} \\ &= 2e^{\frac{b}{4}(\sigma_1+\sigma_2+\sigma_3+\sigma_4)} \cosh(K(\sigma_1+\sigma_2+\sigma_3+\sigma_4)+b) \; . \end{aligned} \tag{20.3}$$

Wir haben berücksichtigt, daß die Beiträge $\frac{3}{4}(\sigma_1 + \sigma_2 + \sigma_3 + \sigma_4)$ auf die anderen drei nächsten weißen Nachbarn aufgeteilt werden.

Man kann nun nicht mehr erwarten, daß das schwarze Teilsystem identisch mit dem ursprünglichen wird. Die allgemeinste Wechselwirkung der 4 schwarzen Spins, die in einem Summationsschritt entstehen kann, ist

$$\begin{aligned}&e^{2g} \exp\Big(\frac{1}{2}K_1'(\sigma_1\sigma_2+\sigma_2\sigma_3+\sigma_3\sigma_4+\sigma_4\sigma_1) + K_2'(\sigma_1\sigma_3+\sigma_2\sigma_4) + K_3'(\sigma_1\sigma_2\sigma_3\sigma_4)\Big) \\ &\quad\times \exp\Big(\frac{b_1'}{4}(\sigma_1+\sigma_2+\sigma_3+\sigma_4) + \frac{b_3'}{4}(\sigma_1\sigma_2\sigma_3+\sigma_1\sigma_2\sigma_4+\sigma_1\sigma_3\sigma_4+\sigma_2\sigma_3\sigma_4)\Big) \; .\end{aligned} \tag{20.4}$$

Die Produkte dieser Beiträge aller weißen Spins liefert den neuen Hamilton-Operator $e^{-\tilde{H}(\sigma_{\text{schwarz}})}$. Es ergeben sich wegen Zyklizität 6 Gleichungen für die 6 Koeffizienten $g, K_1', K_2', K_3', b_1', b_3'$:

$$\begin{aligned}
&(++++) && 2e^{b}\cosh(4K+b) = e^{2g+2K_1'+2K_2'+K_3'+b_1'+b_3'} \; , \\
&(----) && 2e^{-b}\cosh(4K-b) = e^{2g+2K_1'+2K_2'+K_3'-b_1'-b_3'} \; , \\
&(+---) && 2e^{-\frac{b}{2}}\cosh(2K-b) = e^{2g-K_3'-\frac{b_1'}{2}+\frac{b_3'}{2}} \; , \\
&(-+++) && 2e^{\frac{b}{2}}\cosh(2K+b) = e^{2g-K_3'+\frac{b_1'}{2}-\frac{b_3'}{2}} \; , \\
&(++--) && 2\cosh b = e^{2g-2K_2'+K_3'} \; , \\
&(+-+-) && 2\cosh b = e^{2g-2K_1'+2K_2'+K_3'} \; .
\end{aligned} \tag{20.5}$$

Die Lösung dieser RG-Gleichungen ist

$$\begin{aligned}
K_1' &= 2K_2' = \frac{1}{8}\ln\Big(\frac{\cosh(4K+b)\cosh(4K-b)}{\cosh^2 b}\Big) \; , \\
K_3' &= \frac{1}{16}\ln\Big(\frac{\cosh^6 b\cosh(4K+b)\cosh(4K-b)}{\cosh^4(2K+b)\cosh^4(2K-b)}\Big) \; , \\
g &= \frac{1}{32}\ln\Big(2^8\cosh^6 b\cosh(4K+b)\cosh(4K-b)\cosh^4(2K+b)\cosh^4(2K-b)\Big) \; ,
\end{aligned}$$

$$
\begin{aligned}
b_1' &= b + \frac{1}{4}\ln\Big(\frac{\cosh(4K+b)\cosh^2(2K+b)}{\cosh(4K-b)\cosh^2(2K-b)}\Big)\ , \\
b_3' &= \frac{1}{4}\ln\Big(\frac{\cosh(4K+b)\cosh^2(2K-b)}{\cosh(4K-b)\cosh^2(2K+b)}\Big)\ .
\end{aligned}
\tag{20.6}
$$

Im nächsten Schritt entstehen wieder neue Wechselwirkungen, und insgesamt findet der Fluß in einem unendlich-dimensionalen Raum X aller Kopplungen statt. Wie zuvor diskutiert wird dieser Fluß manche Wechselwirkungen verstärken, andere abschwächen. Ähnlichkeit mit dem Ausgangs-Hamilton-Operator erfordert $K_3' = 0 = b_3'$ als irrelevante Kopplung. Sind die Spins langreichweitig korreliert, dann dürfen wir

$$
(\sigma_1\sigma_3 + \sigma_2\sigma_4) = \frac{1}{2}(\sigma_1\sigma_2 + \sigma_2\sigma_3 + \sigma_3\sigma_4 + \sigma_4\sigma_1)
$$

erwarten. Die Beziehung ist richtig für 3 oder 4 gleiche σ_i in (20.6). In dieser Näherung entsteht tatsächlich das ursprüngliche Modell, um $\frac{\pi}{4}$ gedreht, mit Kopplung nächster Nachbarn

$$
\begin{aligned}
K' &:= K_1' + K_2' = \frac{3}{16}\ln\frac{\cosh(4K+b)\cosh(4K-b)}{\cosh^2 b}\ , \\
g &= \frac{1}{32}\ln\Big(256\cosh^6(b)\cosh(4K{+}b)\cosh(4K{-}b)\cosh^4(2K{+}b)\cosh^4(2K{-}b)\Big)\ , \\
b' &= b_1' = b + \frac{1}{4}\ln\frac{\cosh(4K+b)\cosh^2(2K+b)}{\cosh(4K-b)\cosh^2(2K-b)}\ .
\end{aligned}
\tag{20.7}
$$

Diese RG-Gleichungen haben nun einen nichttrivialen Fixpunkt $K_\star = K = K' = \frac{3}{8}\ln\cosh(4K_\star)$ und $b_\star = 0$, numerisch $K_\star = 0.50698$. An diesem Punkt ist tatsächlich $K_3' = -0.05324$ recht klein. Im Vergleich zur exakten Lösung $K_\star = K_\star^* = \frac{1}{2}\ln(1+\sqrt{2}) = 0.4407$ ist das gar nicht so schlecht.

Die Renormierungsgruppengleichung liefert

$$
\begin{aligned}
\frac{1}{N^2}\ln\mathcal{Z}_{N^2}(K,b) &= g(K,b) + \frac{1}{2}\frac{2}{N^2}\ln\mathcal{Z}_{\frac{N^2}{2}}(K',b')\ . \\
\Rightarrow \qquad f(K',b') &= 2f(K,b) - 2g(K,b)\ .
\end{aligned}
\tag{20.8}
$$

Entsprechend der Singularität der spezifischen Wärme nehmen wir $f(K,0) = A\cdot(K-K_\star)^{2-\alpha}$ an. Wegen $K' - K_\star = \frac{\partial K'}{\partial K}(K-K_\star)$ und unter Berücksichtigung, daß $g(K,0)$ reguläre Ableitungen nach K hat, folgt

$$
\begin{aligned}
2A(K-K_\star)^{2-\alpha} &= A\Big(\frac{\partial K'}{\partial K}\Big)^{2-\alpha}_{K\mapsto K_\star}(K-K_\star)^{2-\alpha} \\
\Rightarrow \qquad \alpha &= 2 - \frac{\ln 2}{\ln\frac{\partial K'}{\partial K}|_{K=K_\star}} = 2 - \frac{\ln 2}{\ln(\frac{3}{2}\tanh(4K_\star))} \approx 0.1308\ .
\end{aligned}
\tag{20.9}
$$

Das ist eine durchaus brauchbare Näherung zum exakten Ergebnis $\alpha = 0$.

Die Relation $\frac{\tilde{\tau}}{\tau} = L^x$, aus der wir (19.19) hergeleitet hatten, ist mit $L = \sqrt{2}$ und $x = \frac{1}{\nu}$ äquivalent zu

$$\begin{aligned}\frac{K' - K_\star}{K - K_\star} &= \frac{\partial K'}{\partial K}\Big|_{K \mapsto K_\star} = \sqrt{2}^x = \sqrt{2}^{\frac{1}{\nu}} \\ \Rightarrow \qquad \nu &= \frac{\ln 2}{2\ln(\frac{3}{2}\tanh(4K_\star))} = 0.9346\;, \end{aligned} \tag{20.10}$$

in Übereinstimmung mit $2\nu = 2 - \alpha$ gemäß (19.19).

21 Das Gauß-Modell

Viele Varianten der Blockspin-Transformation führen im Limes unendlich vieler Iterationen auf kontinuierliche Spins. Das nun einzuführende Gauß-Modell wird sich als häufig vorkommender Fixpunkt der RG-Transforamtion erweisen.

Ausgangspunkt ist das Ising-Modell, das wir wie folgt schreiben:

$$\mathcal{Z} = \int_{\mathbb{R}^{N^D}} \prod_{j=1}^{N^D} \Big(ds_j\, \delta(s_j^2 - 1)\ \exp\Big(K \sum_{\hat{i}=1}^{D} s_j s_{j+\hat{i}} + h s_j\Big)\Big)\;. \tag{21.1}$$

Dabei ist $s_{j+\hat{i}}$ der Spin am zu $j \in \mathbb{Z}^D$ benachbarten Gitterpunkt $j + e_{\hat{i}}$. Der Graph des Maßes $\delta(s_j^2 - 1)$ besteht aus zwei Strahlen bei $s_j = \pm 1$. Diese werden nun zu Verteilungen gewisser Breite und endlicher Höhe ausgeschmiert und schließlich zu einer in 0 zentrierten Gauß-Funktion verschmolzen: $\delta(s_j^2 - 1) \mapsto e^{-\frac{B}{2}s_j^2}$. Es entsteht

$$\begin{aligned}\delta(s_j^2 - 1) e^{K\sum_{\hat{i}=1}^{D} s_j s_{j+\hat{i}} + h s_j} &\mapsto e^{K\sum_{\hat{i}=1}^{D} s_j s_{j+\hat{i}} - \frac{B}{2}s_j^2 + h s_j} \\ &= e^{-\frac{K}{2}\sum_{\hat{i}=1}^{D}(s_{j+\hat{i}} - s_j)^2 - (\frac{B}{2} - DK)s_j^2 + h s_j}\;. \end{aligned} \tag{21.2}$$

Der Exponent wird nun durch Spinwellen $\sigma_q = \sum_{n=1}^{N^D} e^{\frac{2\pi \mathrm{i}}{N}\langle q,n\rangle} s_n$ ausgedrückt:

$$\begin{aligned}&\sum_{j=1}^{N^D} \Big(-\frac{K}{2}\sum_{\hat{i}=1}^{D}(s_{j+\hat{i}} - s_j)^2 - \frac{K}{2}\underbrace{\frac{B - 2DK}{K}}_{=:r} s_j^2 + h s_j \Big) \\ &= h\sigma_0 - \int_{[-\frac{N}{2},\frac{N}{2}]^D} dq \frac{K}{2}\big(|e^{\frac{2\pi \mathrm{i}}{N}q_{\hat{i}}} - 1|^2 + r\big)\sigma_q \sigma_{-q}\;. \end{aligned} \tag{21.3}$$

Dabei ist $q_{\hat{i}}$ in Gittereinheiten gezählt. Nimmt man die Gitterweite a mit, also $e^{\frac{2\pi \mathrm{i}}{N}q_{\hat{i}}a}$, dann entsteht im Kontinuumslimes $a \to 0$ nach weiteren Reskalierungen von K, r, q sowie Redefinitionen von σ_q zu $\phi(q)$

$$S(\phi) \sim -h\phi(0) + \int_{\|q\| \leq \Lambda} dq\ \Big(\frac{1}{2}(\|q\|^2 + r)\phi(q)\phi(-q) - h\phi(0)^2\Big)\;. \tag{21.4}$$

Der letzte Ausdruck ist exakt die Euklidische Wirkung des freien Skalarfeldes. Sämtliche Transformationen von s_j über σ_q zu $\phi(q)$ sind nun noch im verbleibenden Maß $\prod_{j=1}^{N^D} ds_j$ in (21.1) vorzunehmen. Formal entsteht dabei ein sogenanntes Funktionalintegral

$$\prod_{j=1}^{N^D} \int_{\mathbb{R}} ds_j \mapsto \int \mathcal{D}\phi \sim \prod_{\|q\| \leq \Lambda} \int_{\mathbb{R}} d\phi(q) \; . \tag{21.5}$$

Diese Schritte sind so nicht zu rechtfertigen. Allerdings läßt sich zeigen, daß das Endergebnis tatsächlich ein korrektes Wahrscheinlichkeitsmaß

$$d\mu := \frac{\mathcal{D}\phi}{\mathcal{Z}} \, e^{-\int_{\|q\|\leq\Lambda} dq \, \left(\frac{1}{2}(\|q\|^2+r)\phi(q)\phi(-q) - h\phi(0)^2\right)} \tag{21.6}$$

definiert.

Wir führen nun die RG-Transformation im Impulsraum durch:

i) *Ausintegration der Freiheitsgrade.* Wir integrieren in der Zustandssumme $\mathcal{Z} = \displaystyle\int \Big(\prod_{|q|\leq\Lambda} d\phi(q)\Big) \, e^{-S}$, mit S gegeben durch (21.4), über die Moden $\phi(q)$ in der Kugelschale $\frac{\Lambda}{L} < \|q\| \leq \Lambda$. Da e^{-S} faktorisiert in einen Term, der nur von den Moden in der Kugelschale abhängt und einen Term, der nur von den Moden mit $\|q\| < \frac{\Lambda}{L}$ abhängt, liefert diese Integration einfach einen Faktor:

$$\begin{aligned} \mathcal{Z} &= e^{\Omega} \int \Big(\prod_{|q|\leq\frac{\Lambda}{L}} d\phi(q)\Big) \, e^{-S_L} \; , \\ S_L &= -h\phi(0) + \int_{\|q\|\leq\frac{\Lambda}{L}} dq \, \Big(\frac{1}{2}(\|q\|^2 + r)\phi(q)\phi(-q)\Big) \; . \end{aligned} \tag{21.7}$$

Die genaue Form des Vorfaktors Ω, der von Λ, L, g, r abhängt, wird nicht benötigt.

ii) *Reskalierung.* Durch $q = \frac{\tilde{q}}{L}$ transformieren wir auf neue Impulsvariablen mit gleichem Bereich $\|\tilde{q}\| \leq \Lambda$:

$$S_L = -h\phi(0) + \frac{1}{L^D} \int_{\|\tilde{q}\|\leq\Lambda} d\tilde{q} \, \Big(\frac{1}{2}(\frac{1}{L^2}\|\tilde{q}\|^2 + r)\phi(\tfrac{\tilde{q}}{L})\phi(-\tfrac{\tilde{q}}{L})\Big) \; . \tag{21.8}$$

iii) *Renormierung.* Um wieder auf die Standardform (21.4) zu kommen, ist eine *Wellenfunktions-Renormierung* der Blockspin-Variablen durchzuführen:

$$\phi'(\tilde{q}) := \frac{1}{\sqrt{L^{D+2}}}\phi(\tfrac{\tilde{q}}{L}) \; . \tag{21.9}$$

In diesen neuen Variablen lautet die Wirkung

$$\begin{aligned} S_L &= -\tilde{h}\phi'(0) + \int_{\|\tilde{q}\|\leq\Lambda} d\tilde{q}\,\Big(\frac{1}{2}(\|\tilde{q}\|^2+\tilde{r})\phi'(\tilde{q})\phi(-\tilde{q})\Big)\;, \\ \tilde{r} &= L^2 r\;, \qquad \tilde{h} = L^{\frac{D+2}{2}}h\;. \end{aligned} \tag{21.10}$$

Der interessante Fixpunkt des Gauß-Modells ist $r_\star = h_\star = 0$. Der Parameter r ist ein Massequadrat bzw. inverses Quadrat der Korrelationslänge: $r = m^2 = \frac{1}{\xi^2}$. Somit folgt wie erwartet $\sqrt{\frac{r}{\tilde{r}}} = \frac{\tilde{\xi}}{\xi} = \frac{1}{L}$. Aus der zweiten Beziehung $\tilde{h} = L^y h$ ergibt sich $y = \frac{D+2}{2} \equiv Db$, also $b = \frac{1}{2} + \frac{1}{D}$. Andererseits war $r = \frac{B-2DK}{K} = \frac{BT-2DJ}{J} \sim \tau \sim \xi^{-\frac{1}{2}}$, so daß wir $\nu = \frac{1}{2}$ ablesen. Es folgt $\alpha = 2 - \frac{D}{2}$ und somit $a = \frac{2}{D}$. Damit sind alle kritischen Exponenten bestimmt:

$$\begin{aligned} &\alpha = 2 - \frac{D}{2}\;, \qquad \beta = \frac{D-2}{4}\;, \qquad \gamma = 1\;, \qquad \delta = \frac{D+2}{D-2}\;, \\ &\nu = \frac{1}{2}\;, \qquad\quad\;\; \eta = 0\;. \end{aligned} \tag{21.11}$$

In $D = 4$ Dimensionen ergeben sich die Exponenten der Molekularfeldnäherung. In $D = 2$ ist $\delta = \infty$, d.h. es gibt keine spontane Magnetisierung (Mermin-Wagner-Hohenberg-Theorem).

22 Landau-Ginzburg-Wilson-Modell (bzw. ϕ^4-Modell)

Eine deutlich bessere Beschreibung des Ising-Maßes $\delta(s_j^2-1)$ wird durch $e^{+\frac{B}{2}s_j^2-us_j^4}$ erhalten. Nach Übergang zu Spinwellen und Kontinuumslimes entsteht an Stelle von (21.4) die ϕ^4-Wirkung

$$\begin{aligned} S(\phi) := &\int_{\|q\|\leq\Lambda} dq\;\frac{1}{2}(\|q\|^2+r)\phi(q)\phi(-q) \\ &+ u\int dq_1\,dq_2\,dq_3\,dq_4\;\delta(q_1+q_2+q_3+q_4)\prod_{k=1}^{4}\Theta(q_k^2-\Lambda^2)\phi(q_k)\;. \end{aligned} \tag{22.1}$$

Der Parameter u wird als sehr klein angenommen. Ziel ist wieder die Integration über Moden $\phi(q)$ mit $\frac{\Lambda}{L} \leq \|q\| \leq \Lambda$. Durch den ϕ^4-Term faktorisiert S jedoch nicht mehr, so daß der erste RG-Schritt, im Gegensatz zum Gauß-Modell, sehr schwierig wird. Wir erarbeiten uns eine Näherungslösung für sehr kleine u. Das Verfahren läßt sich in $D < 4$ Dimensionen rechtfertigen.

22.1 Ausintegration der Freiheitsgrade

Wir schreiben $\phi(q) \mapsto \phi(q) + \sigma(q)$ mit $\sigma(q) = 0$ für $\|q\| < \frac{\Lambda}{L}$ und $\phi(q) = 0$ für $\frac{\Lambda}{L} \leq \|q\| \leq \Lambda$. Die 'inneren Quantenfelder' σ sind dann auszuintegrieren, während die 'äußeren klassischen Felder' ϕ überleben und die Variablen der effektiven Theorie bilden:

$$\int \prod d\sigma e^{-S(\sigma,\phi)} = e^{-S(\phi)} \int \prod_{\frac{\lambda}{L} \leq \|q\| \leq \Lambda} \Big(d\sigma(q)\ e^{-\frac{1}{2}(\|q\|^2+r)\sigma(q)\sigma(-q)} \Big) e^{-\sum_{i=1}^4 V_i(\phi,\sigma)} \ , \tag{22.2}$$

$$V_1(\phi,\sigma) = 4u \int dq_1\, dq_2\, dq_3\, dq_4\ \delta(q_1+q_2+q_3+q_4)\phi(q_1)\phi(q_2)\phi(q_3)\sigma(q_4) \ ,$$
$$V_2(\phi,\sigma) = 6u \int dq_1\, dq_2\, dq_3\, dq_4\ \delta(q_1+q_2+q_3+q_4)\phi(q_1)\phi(q_2)\sigma(q_3)\sigma(q_4) \ ,$$
$$V_3(\phi,\sigma) = 4u \int dq_1\, dq_2\, dq_3\, dq_4\ \delta(q_1+q_2+q_3+q_4)\phi(q_1)\sigma(q_2)\sigma(q_3)\sigma(q_4) \ ,$$
$$V_4(\phi,\sigma) = u \int dq_1\, dq_2\, dq_3\, dq_4\ \delta(q_1+q_2+q_3+q_4)\sigma(q_1)\sigma(q_2)\sigma(q_3)\sigma(q_4) \ ,$$

Solche Integrale sind typisch für die Quantenfeldtheorie. Zu beachten ist jedoch, daß nur über Quantenfelder mit Impulsen in einer Kugelschale integriert wird. Wir gehen nun auf einige Techniken ein.

- *Quellen.* Man fügt im Exponenten in (22.2) einen sogenannten Quellterm hinzu:
$$e^{\int_{\frac{\lambda}{L} \leq \|q\| \leq \Lambda} dq\ \sigma(q) J(-q)} \ .$$
Ganz am Ende wird wieder $J = 0$ gesetzt. Zunächst ersetzt man in den 'Potentialen' V_i die Quantenfelder σ durch (Funktional-)ableitungen nach den Quellen, $\phi(q) = \frac{\delta}{\delta J(-q)}$. Diese lassen sich mathematisch als Fréchet und Gâteau-Ableitungen fassen; es genügt aber eine formale Behandlung mit der Rechenregel $\frac{\delta J(p)}{\delta J(q)} = \delta(p-q)$.

- *Gauß-Integration.* Die Ableitungsoperatoren $e^{-V_i(\phi,\frac{\partial}{\partial J})}$ können vor die σ-Integrale gezogen werden. Es verbleibt dann ein (kontinuierlich parametriertes) Produkt von Gauß-Integralen
$$\int_{\mathbb{R}^2} d\sigma(q) d\sigma(-q)\ e^{-\frac{1}{2}(\|q\|^2+r)\sigma(q)\sigma(-q)+\sigma(q)J(-q)} = \frac{2\pi}{\|q\|^2+r} e^{-\frac{J(q)J(-q)}{2(\|q\|^2+r)}} \ . \tag{22.3}$$
Insgesamt entsteht
$$\int \prod d\sigma e^{-S(\sigma,\phi)} = e^{\Omega - S(\phi) + S'(\phi)} \ , \tag{22.4}$$
$$S'(\phi) = \ln \Big\{ e^{-V(\phi,\frac{\partial}{\partial J})} \Big(\exp\Big(\int_{\frac{\Lambda}{L} \leq \|q\| \leq \Lambda} dq\ \frac{J(q)J(-q)}{2(\|q\|^2+r)} \Big) \Big) \Big\}_{J=0} \ .$$
Dabei wird $\Omega = -\int_{\frac{\Lambda}{L} \leq \|q\| \leq \Lambda} dq\ \ln \frac{q^2+r}{2\pi}$ aus dem Vorfaktor in (22.3) gebildet. Dieser Faktor ist bei der Berechnung der freien Energie mitzunehmen, spielt aber keine Rolle in der RG-Transformation.

- *Störungstheorie.* Offenbar gilt

$$\ln\left(e^{-V(\phi,\frac{\partial}{\partial J})}e^{Q(J)}\right) = Q(J) + \ln\left(1 + e^{-Q(J)}\left(e^{-V(\phi,\frac{\partial}{\partial J})} - 1\right)e^{Q(J)}\right)\,. \quad (22.5)$$

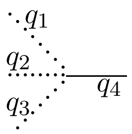
  Man entwickelt nun sowohl e^{-V} in eine Potenzreihe nach V als auch $\ln(1+x)$ in eine Potenzreihe nach x. Drückt man die einzelnen Beiträge durch Graphen aus (s.u.), dann besagt ein Theorem aus der Kombinatorik, daß sich alle nichtzusammenhängenden Beiträge kompensieren und nur der zusammenhängende Teil ('conn' in der nächsten Formel) übrig bleibt:

$$\ln\left(1+e^{-Q(J)}\left(e^{-V(\phi,\frac{\partial}{\partial J})}-1\right)e^{Q(J)}\right) = \sum_{k=1}^{\infty}\frac{(-1)^k}{k!}e^{-Q(J)}\left(V(\phi,\tfrac{\partial}{\partial J})\right)^k e^{Q(J)}\Big|_{conn.} \quad (22.6)$$

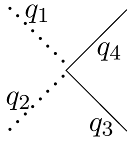
- *Feynman-Graphen.* Die Beiträge zu (22.6) lassen sich am besten auf graphische Weise erfassen. Graphen bestehen Vertizes sowie Linien zwischen den Vertizes. In diesem Modell gibt es wegen (22.2) vier Typen von Vertices. Alle Quantenfelder σ sind ausintegriert, was durch innere (durchgezogene) Linien symbolisiert wird. Die äußeren Felder ϕ treten nur als Dekorationen an den jeweiligen Vertizes auf. Jeder der vier Strahlen pro Vertex trägt eine Impulsvariable q. Insgesamt haben wir die folgenden Bausteine und Gewichte

Q : 

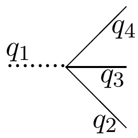
$$= \frac{\delta(q_1+q_2)\Theta(\Lambda - \|q_1\|)\Theta(\|q_1\| - \frac{\Lambda}{L})}{\|q_1\| + r} \quad (22.7)$$

V_1 : 

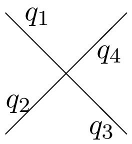
$$= u\int d(q_1,q_2,q_3,q_4)\delta(q_1+q_2+q_3+q_4)\phi(q_1)\phi(q_2)\phi(q_3)$$

V_2 : 

$$= u\int d(q_1,q_2,q_3,q_4)\delta(q_1+q_2+q_3+q_4)\phi(q_1)\phi(q_2)$$

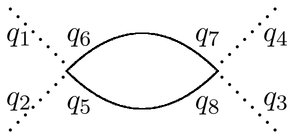
V_3 : 

$$= u\int d(q_1,q_2,q_3,q_4)\delta(q_1+q_2+q_3+q_4)\phi(q_1)$$

V_4 : 

$$= u\int d(q_1,q_2,q_3,q_4)\delta(q_1+q_2+q_3+q_4)$$

Dabei sind die q-Ingtegrationen nach Multiplikation mit den Gewichten der Linien auszuführen. Hier ist ein typisches Beispiel:



$$
\begin{aligned}
&= u^2 \int d(q_1, \ldots, q_8)\delta(q_1+q_2+q_5+q_6)\delta(q_7+q_8+q_3+q_4) \\
&\times \frac{\delta(q_5+q_8)\Theta(\Lambda-\|q_5\|)\Theta(\|q_5\|-\frac{\Lambda}{L})}{\|q_5\|+r} \frac{\delta(q_6+q_7)\Theta(\Lambda-\|q_6\|)\Theta(\|q_6\|-\frac{\Lambda}{L})}{\|q_6\|+r} \\
&\times \phi(q_1)\phi(q_2)\phi(q_3)\phi(q_4) \; . \qquad (22.8)
\end{aligned}
$$

Weiter sind Vorzeichen sowie kombinatorische Faktoren mitzunehmen. Diese Faktoren zählen, auf wieviele Weisen die durchgezogenen Linien mit den Vertizes zu verbinden sind.

Insgesamt entstehen zusammen mit dem Vorfaktor $e^{-S(\phi)}$ in (22.2) Terme der gleichen Form wie in $S(\phi)$ selbst, sowie gänzlich andere Wechselwirkungen wie z.B. $\mathcal{O}(\phi^6)$. Hier ist wieder zu zeigen, daß letztere 'irrelevant' sind. Beschränken wir uns auf Beiträge der gleichen Form, so ergibt das Integral (22.4) in erster Ordnung u folgende Beiträge:

$$
\begin{aligned}
&- \ln\Big(\int \prod d\sigma \; e^{-S(\sigma,\phi)}\Big) \\
&= -\Omega' + \int_{\|q\|\leq\frac{\Lambda}{L}} dq \; \frac{1}{2}\Big(\|q\|^2 + r + 12u \int_{\frac{\Lambda}{L}\leq\|p\|\leq\Lambda} \frac{dp}{\|p\|^2+r} + \mathcal{O}(u^2)\Big)\phi(q)\phi(-q) \\
&+ \int dq_1\, dq_2\, dq_3\, dq_4 \; \delta(q_1+q_2+q_3+q_4) \prod_{k=1}^{4} \Theta(\|q_k\| - \tfrac{\Lambda}{L})\phi(q_k) \\
&\quad \times \Big(u - 36u^2 \int_{\frac{\Lambda}{L}\leq\|p\|\leq\Lambda} \frac{dp\; \Theta_{\frac{\Lambda}{L},\Lambda}(\|q_1+q_2-p\|)}{(\|p\|^2+r)(\|q_1+q_2-p\|^2+r)} + \mathcal{O}(u^3)\Big) \; . \qquad (22.9)
\end{aligned}
$$

Dabei umfaßt Ω' alle ϕ-unabhängigen Beiträge.

22.2 Reskalierung und Renormierung

Durch identische Reskalierung $q = \frac{\tilde{q}}{L}$ und Renormierung $\phi'(\tilde{q}) := \frac{1}{\sqrt{L^{D+2}}}\phi(\frac{\tilde{q}}{L})$ wie im Gauß-Modell transformieren wir auf die Standardform des Landau-Ginzburg-Wilson-Modells. Es ergeben sich die folgenden renormierten Kopplungskonstanten $\tilde{r}, \tilde{u}$, wobei $\tilde{u}$ gemäß (22.9) zunächst von den äußeren Impulsen $\tilde{q}_i$ abhängt:

$$
\tilde{r} = L^2\Big(r + 12u \int_{\frac{\Lambda}{L}\leq\|p\|\leq\Lambda} \frac{dp}{\|p\|^2+r} + \mathcal{O}(u^2)\Big) \; , \qquad (22.10)
$$

$$
\begin{aligned}
\tilde{u} &= L^{4-D}\Big(u - 12u^2 \int_{\frac{\Lambda}{L}\leq\|p\|\leq\Lambda} \frac{dp\; \Theta_{\frac{\Lambda}{L},\Lambda}(\|\frac{\tilde{q}_1}{L} + \frac{\tilde{q}_2}{L} - p\|)}{(\|p\|^2+r)(\|\frac{\tilde{q}_1}{L}+\frac{\tilde{q}_2}{L}-p\|^2+r)} \\
&\quad - 12u^2\big\{\tilde{q}_2 \mapsto \tilde{q}_3\big\} - 12u^2\big\{\tilde{q}_2 \mapsto \tilde{q}_4\big\} + \mathcal{O}(u^3)\Big) \; . \qquad (22.11)
\end{aligned}
$$

Die Gleichung für $\tilde{u}$ ergibt sich wie folgt: Drei unabhängige Impulsintegrationen liefern $\frac{1}{L^{3D}} = \frac{1}{L^{4\frac{D+2}{2}}} \cdot L^{4-D}$, von denen der erste Faktor $\frac{1}{L^{4\frac{D+2}{2}}}$ in der Redefinition zu ϕ' absorbiert wird.

Die weitere Behandlung der Integrale geschieht für $L \searrow 1$. Dann gilt (stark vereinfachend!)

$$\int_{\frac{\Lambda}{L}\leq\|p\|\leq\Lambda} \frac{dp}{\|p\|^2+r} \to \frac{1}{\Lambda^2+r}\frac{C}{4}\Lambda^D(L-1)\;, \tag{22.12}$$

$$\int_{\frac{\Lambda}{L}\leq\|p\|\leq\Lambda} \frac{dp\;\Theta_{\frac{\Lambda}{L},\Lambda}(\|\frac{\tilde{q}_1}{L}+\frac{\tilde{q}_2}{L}-p\|)}{(\|p\|^2+r)(\|\frac{\tilde{q}_1}{L}+\frac{\tilde{q}_2}{L}-p\|^2+r)} \to \frac{1}{(\Lambda^2+r)^2}\frac{C}{4}\Lambda^D(L-1)\;, \tag{22.13}$$

wobei $\frac{C}{4}\Lambda^D(L-1)$ das Volumen der Kugelschale $\frac{\Lambda}{L} \leq \|p\| \leq \Lambda$ ist. Es entsteht

$$\frac{\tilde{r}}{\Lambda^2} = L^2\Big(\frac{r}{\Lambda^2} + \frac{3Cu(L-1)\Lambda^{D-4}}{1+\frac{r}{\Lambda^2}} + \mathcal{O}(u^2)\Big)\;, \tag{22.14}$$

$$\tilde{u}(L-1)\Lambda^{D-4} = L^{4-D}\Big(u(L-1)\Lambda^{D-4} - \frac{9C(u(L-1)\Lambda^{D-4})^2}{(1+\frac{r}{\Lambda^2})^2} + \mathcal{O}(u^3)\Big)$$

oder nach Umdefinition $R=\frac{r}{\Lambda^2}$ und $U = u(L-1)\Lambda^{D-4}$

$$\tilde{R} = L^2\Big(R+\frac{3CU}{1+R}\Big)\;, \qquad \tilde{U} = L^{4-D}\Big(U - \frac{9CU^2}{1+R}\Big)\;. \tag{22.15}$$

Wir suchen nun die Fixpunkte dieser Gleichungen. Zunächst gibt es den gleichen Fixpunkt $R_\star = U_\star = 0$ wie im Gauß-Modell. In Abhängigkeit von der Dimension gibt es jedoch einen weiteren Fixpunkt. Wir nehmen an, daß R sehr klein ist und gegen 1 vernachlässigt werden kann. Dann liefert die zweite Gleichung die Näherungslösung

$$U_\star = \frac{1-L^{D-4}}{9C}\;, \qquad R_\star = -\frac{3L^2}{L^2-1}CU_\star\;. \tag{22.16}$$

Wir diskutieren die Dimension:

- $D=4$ Es folgt $U_\star = R_\star = 0$, d.h. wir finden den Fixpunkt des Gauß-Modells.
- $D>4$ Zunächst folgt $U_\star < 0$ und $R_\star > 0$. Dann ist aber die effektive Wirkung $S \sim \int(q^2+R_\star)\phi^2 + U_\star\int\phi^4$ für die verbleibenden Freiheitsgrade ϕ nach unten unbeschränkt und ergibt kein sinnvolles Modell. Damit ist dieser Fixpunkt für $D>4$ auszuschließen.
- $D<4$ Nun ist $U_\star > 0$ und $R_\star < 0$, und die effektive Wirkung bleibt nach unten beschränkt.

Dieser *Wilson-Fisher-Fixpunkt* $(U_\star, R_\star)$ existiert somit in $D < 4$ Dimensionen. Er beschreibt ein gänzlich anderes Modell als das Gauß-Modell. Die kritischen Exponenten des Wilson-Fisher-Fixpunkts lassen sich durch die *ε-Entwicklung* berechenen, wobei man $D = 4 - \varepsilon$ setzt. Das Ergebnis in Ordnung ϵ^1 ist (siehe Wilson-Kogut, Table 8.1; dort sind die Exponenten bis Ordnung ϵ^3 und ϵ^4 angegeben):

$$\begin{aligned} &\alpha = \frac{\varepsilon}{6}\,, && \beta = \frac{1}{2} - \frac{\varepsilon}{6}\,, && \gamma = 1 + \frac{\varepsilon}{6}\,, && \delta = 3 + \varepsilon\,, \\ &\nu = \frac{1}{2} + \frac{\varepsilon}{12}\,, && \eta = \mathcal{O}(\varepsilon^2)\,. \end{aligned} \tag{22.17}$$

Berücksichtigt man auch die nächsten Ordnungen, so ergibt sich für $D = 3$, also $\varepsilon = 1$, eine bemerkenswerte Übereinstimmung mit numerischen Rechnungen des $D = 3$-dimensionalen Isingmodells (siehe Wilson-Kogut, Table 8.2).

23 Ausblick: Renormierung in der Quantenfeldtheorie

Viele der Renormierungsgruppen-Methoden übertragen sich auf die Quantenfeldtheorie in ihrer Euklidischen Formulierung. Ausgangspunkt ist eine Zustandssumme der Art

$$\mathcal{Z}(J) = \int \mathcal{D}\phi\; e^{-S(\phi) + \int dx\, J(x)\phi(x)}\,, \tag{23.1}$$

wobei $\mathcal{D}\phi = \prod_{x \in \mathbb{R}^D} d\phi(x)$ das formale Funktionalmaß und $S(\phi)$ die Wirkung ist. Ein wichtiges Beispiel ist die ϕ^4-Wirkung:

$$S(\phi) = \int_{\mathbb{R}^D} dx\, \Big(\frac{1}{2}\phi(x)\big(-\Delta + m^2\big)\phi(x) + \frac{\lambda}{4!}\phi^4(x)\Big)\,. \tag{23.2}$$

Nach Übergang zum Impulsraum (Fourier-Transformation) ist das exakt die Problemstellung des Landau-Ginzburg-Wilson-Modells (mit $m^2 \mapsto r$ und $\lambda \mapsto u$). Der entscheidende Unterschied ist jedoch, daß sich die Beschränkung (cut-off) der Impulse $\|q\| \leq \Lambda$, die in der Statistischen Physik durch die Gitterweite hervorgerufen wird, so nicht rechtfertigen läßt. Hier muß der cut-off Λ künstlich eingeführt werden (Regularisierung), und dann müssen Größen extrahiert werden, die einen Limes $\Lambda \to \infty$ haben (Renormierung). Diese Größen sind formal die Momente

$$\begin{aligned} S(x_1, \dots x_N) &:= \frac{1}{\mathcal{Z}} \int \mathcal{D}\phi\; \phi(x_1) \cdots \phi(x_N) e^{-S(\phi) + \int dx\, J(x)\phi(x)} \\ &= \frac{1}{\mathcal{Z}} \frac{\delta^N \mathcal{Z}(J)}{\delta J(x_1) \cdots \delta J(x_N)} \end{aligned} \tag{23.3}$$

der Zustandssumme, und diese liefern genau die Kandidaten für Schwinger-Funktionen.

Die konzeptionell eleganteste Beschreibung dieser Renormierung ist eine Kopie des Vorgehens im Landau-Ginzburg-Wilson-Modell (Polchinski, 1983). Man gibt sich eine *beliebige* lokale und Euklidisch-invariante Wirkung vor, parametrisiert durch Kopplungen K^0, an der Skala Λ_0 (das war Λ im LGW-Model). Dann werden die Fourier-Moden $\hat{\phi}(p)$ mit $\Lambda \leq \|p\| \leq \Lambda_0$ ausintegriert (im LGW-Modell war $\Lambda \mapsto \frac{\Lambda}{L}$). Das Ergebnis ist eine *effektive Wirkung* für die verbleibenden niederfrequenten Moden, parametrisiert durch Kopplungskonstanten $K(\Lambda)$, für die man Differentialgleichungen $\Lambda\frac{\partial K(\Lambda)}{\partial \Lambda} = F(K, \Lambda, K^0, \Lambda_0)$ herleitet. Man beweist Schranken für die Lösungen und gewinnt so eine Klassifizierung in

- *relevante Kopplungen* (wachsen mit Potenzen von $\frac{\Lambda_0}{\Lambda}$)
- *marginale Kopplungen* (verhalten sich wie Polynome in $\ln \frac{\Lambda_0}{\Lambda}$)
- *irrelvante Kopplungen* (fallen mit Potenzen von $\frac{\Lambda}{\Lambda_0}$).

An der Endskala $\Lambda_R \approx 0$ sind die Beiträge der irrelevanten Kopplungen gänzlich verschwunden; man kann sie also auch gleich weglassen. Es verbleiben nur wenige relevante/marginale Terme (Universalität). In $D = 4$ Dimensionen sind die Poincaré- und Eichsymmetrie-verträglichen Kopplungen:

i) Skalarfeld: $-\phi\Delta\phi, \phi^2, \phi^3, \phi^4$

ii) Yang-Mills: $F_{\mu\nu}F^{\mu\nu}$ mit $F_{\mu\nu} = \partial_\mu A_\nu - \partial_\nu A_\mu + \mathrm{i}[A_\mu, A_\nu]$

iii) Fermion: $\overline{\psi}(\mathsf{D} + \mathsf{A})\psi$, $\overline{\psi}\psi$

iv) Yukawa-Term $\phi\overline{\psi}\psi$

Umgekehrt werden die relevanten/marginalen Kopplungen *sehr groß* bei Λ_R. Die entscheidende Idee besteht nun in einem *Wechsel der Randbedingungen.* Man fixiert die Werte K^R der relevanten/marginalen Kopplungen bei Λ_R und bestimmt durch inverse Lösung der RG-Transformation die ursprünglichen *und extrem kleinen* $K^0(K^R, \Lambda_R, \Lambda_0)$, die diese Werte hervorrufen. *Es ist diese inverse Lösung, die typischerweise nur in der Störungstheorie möglich ist.* Insgesamt arbeitet man sehr nahe am kritischen Punkt $K^0 = K^R = K_\star = 0$, aber eben nicht exakt bei $K_\star$! Nun sind alle anderen Kopplungen K durch die RG-Transformation $K(K^0(K^R, \Lambda_R, \Lambda_0))$ bestimmt, und man darf hoffen, daß der Limes $\lim_{\Lambda_0 \to \infty} K(K^0(K^R, \Lambda_R, \Lambda_0))$ existiert. Auf diese Weise wird die gesamte effektive Theorie, also die Schwinger-Funktionen (23.3), durch wenige Kalibrierungsexperimente K^R ausgedrückt.

Zu betonen ist jedoch, daß dieses Verfahren (in $D = 4$ Dimensionen) bisher nur störungstheoretisch (d.h. als formale Potenzreihe in kleinen Parametern wie u, λ) beherrscht wird. In $D = 2$ Dimensionen ist wesentlich mehr möglich:

- Das $P(\phi)_2$-Modell, also $S(\phi) = \int_{\mathbb{R}^2} dx\, \big(\frac{1}{2}\phi(x)\big(-\Delta\big)\phi(x) + P(\phi(x))\big)$ mit einem beliebigen, nach unten beschränkten, Polynom P kann maßtheoretisch konstruiert werden [Glimm, Jaffe, Simon, Spencer, $\sim$1974]

- Das *Thirring-Modell* $S(\psi) = \int_{\mathbb{R}^2} dx\, \big(\phi(x)\mathsf{D}\psi + \lambda(\overline{\psi}\gamma\psi)^2\big)$ ist exakt lösbar [Thirring 1958, Hagen, Klaiber 1967].
- Einige Eichtheorien (*Schwinger-Modell* und *Luttinger-Schwinger-Modell*) sind exakt lösbar.
- Die *konforme Gruppe* ist in $D = 2$ Dimensionen sehr reichhaltig; die Symmetrien werden durch die unendlich-dimensionale Virasoro-Algebra beschrieben. Deren Höchstgewichtdarstellungen liefert mit den *Minimalen Modellen* eine ganze Familie von QFT-Modellen.
- Das *Gross-Neveu-Modell* ist die Verallgemeinerung des Thirring-Modells auf N Komponenten. Hier läßt sich die Störungsreihe (nach etlichen Tricks) aufsummieren [Disertori+Rivasseau, 2000].

Zumindest einige dieser Modelle und Methoden sollen im nächsten Semester vorgestellt werden.