

Analytische Berechnung der spontanen Magnetisierung von isotropen homogenen Ising Ferromagneten unter der Verwendung von Graßmann Zahlen

Eingereicht von:

Joachim Pomper

September 2020

Betreut von:

Univ.-Prof. Dipl.-Phys. Dr.rer.nat. Wolfgang von der Linden

Bachelorarbeit

Technische Universität Graz

Analytische Berechnung der spontanen Magnetisierung von isotropen homogenen Ising Ferromagneten unter der Verwendung von Graßmann Zahlen

Joachim Pomper

Abstract

Ziel dieser Arbeit ist die Angabe einer möglichst eleganten Herleitung für die exakte Formel der spontanen Magnetisierung des 2d Ising-Modells in Abhängigkeit von der Temperatur, welche erstmals von Lars Onsager aufgestellt wurde. Dies wird bewerkstelligt indem das graphisch-kombinatorische Problem, welches bei der Beschreibung der Zustandssumme und der Magnetisierung auftritt, mithilfe von Graßmann-Zahlen in ein handhabbares algebraisches Problem übersetzt wird. Mathematische Theoreme wie der starke Szegő Grenzwertsatz dienen zudem als praktische Werkzeuge um Grenzübergänge im Thermodynamischen Limes elegant zu behandeln. Die Arbeit beschränkt sich dabei auf ein homogenes isotropes zweidimensionales Ising-Gitter mit periodischen Randbedingungen. Die Ideen zu dieser Herleitung gehen auf die Arbeiten von Stuart Samuel, Elliot W. Montroll, Renfrey B. Potts und John C. Ward zurück.

Inhaltsverzeichnis

1. Einleitung	1
1.1. Bemerkung zur Notation	2
2. Grundlagen	3
2.1. Ferromagnetisches Ising-Modell	3
2.2. Elemente der Statistischen Mechanik	4
2.3. Spontane Magnetisierung	6
3. Antikommutierende Variablen und Graßmann Algebra	7
3.1. Graßmann-Variablen und Graßmann-Funktionen	7
3.2. Spur-Operation und Berezin-Integral	9
3.3. Gauß-Berezin-Integrale und Pfaffsche Determinante	12
3.4. Graßmann-Korrelationen	15
4. Reformulierung des Ising-Modells	19
4.1. Hochtemperatur-Entwicklung	19
4.2. Korrelation als Zustandssumme auf defektem Gitter	21
4.3. Graphische Repräsentation der Zustandssumme	22
4.4. Graphen ausgedrückt durch Graßmann-Variablen	23
4.4.1. Beitrag der Monomer-Paare	27
4.4.2. Vorzeichen eines zusammenhängenden inneren Graphen ohne Selbst- überschneidung	27
4.4.3. Vorzeichen von Überschneidungen innerer Graphen	29
4.4.4. Wahl der übrigen Koeffizienten	31
4.5. Fouriertransformation der Graßmann-Wirkung	32
5. Exakte Berechnung der horizontalen Spin-Spin-Korrelation	35
5.1. Spin-Spin-Korrelationen ausgedrückt als Graßmann-Korrelationen	35
5.2. Berechnung von Graßmann-Paar-Korrelationen	36
5.2.1. Fouriertransformation der Korrelationen	37
5.2.2. Korrelationen im K-Raum	37
5.2.3. Übergang in den Thermodynamischen Limes	39
5.3. Berechnung der Spin-Spin-Korrelationen	40
6. Exakte Berechnung der spontanen Magnetisierung	43
6.1. Vorbereitung für Szegő-Grenzwertsatz	44
6.2. Die kritische Temperatur T_C	47
6.3. Magnetisierung für $T < T_C$	47
6.4. Magnetisierung für $T > T_C$	49
7. Zusammenfassung und Fazit	50
A. Appendix: Explizite Berechnung der Zustandssumme	52

B. Appendix: Beweise der Eigenschaften Pfaffscher Determinanten mithilfe von Graßmann-Variablen	57
C. Appendix: Permutationen	62
D. Appendix: Fouriermatrix auf 2d Gitter	63
E. Appendix: Satz über Koeffizienten des charakteristischen Polynoms	65
F. Appendix: Nachtrag der verschobenen Rechnungen aus Kapitel 6	67

1. Einleitung

Das Ising-Modell war das erste, nichttriviale Modell eines Ferromagneten und wurde erstmals von seinem Namensgeber Ernst Ising im Rahmen seiner Doktorarbeit 1925 genauer untersucht. Wolfgang Nolting beschreibt die heutige Rolle des Ising-Modells in seinem Lehrbuch wie folgt:

“Es hat sich vielmehr zum allgemeinen Demonstrationsmodell der Statistischen Physik entwickelt. Als das wohl einfachste mikroskopische Modell, das einen Phasenübergang zweiter Ordnung für $d \geq 2$ vollzieht, steht es im Mittelpunkt vieler Überlegungen und Untersuchungen der Theorie der Phasenübergänge und kritischen Phänomene.” [1]

Bei seinen damaligen Untersuchungen konnte Ising nur das eindimensionale Modell exakt lösen. Für das zweidimensionale Modell legte der norwegische Physiker Lars Onsager erstmals 1944 eine exakte Lösung vor und Aussagen über das dreidimensionale Modell sind bis heute nur numerisch zugänglich. Im Jahre 1948 publizierte Onsager zudem die in (1.1) angegebene, exakte Formel für die Temperaturabhängigkeit der spontanen Magnetisierung des zweidimensionalen Ising-Modells, ohne aber seine Herleitung zu veröffentlichen. Erst vier Jahre später, in 1952, gelang es dem Physiker Chen Ning Yang die Formel ebenfalls abzuleiten. Seine Herleitung gilt allerdings als ausgesprochen kompliziert [2].

$$\mathcal{M}_S = \begin{cases} \mathcal{M}_0 \left(1 - \frac{1}{\sinh(\frac{2J}{k_B T})^4}\right)^{\frac{1}{8}} & \text{für } T < T_c \\ 0 & \text{für } T > T_c \end{cases} \quad (1.1)$$

\mathcal{M}_0 beschreibt dabei eine Sättigungs-Magnetisierung für $T = 0$ K und J ist eine Koppelungskonstante, genannt Austauschintegral, welche die Wechselwirkung zwischen den Spins der Gitteratome beschreibt. Eine ausführlichere Beschreibung des Modells findet sich in Abschnitt 2.

Die exakte Lösung eines Statistischen Modells ist insofern wichtig, da sie tiefere Einsichten in das Modell liefert und es als Test-Modell für numerische Näherungsmethoden befähigt, mithilfe derer dann nicht exakt lösbare Modelle untersucht werden können.

Das Ziel dieser Arbeit ist nun die Angabe einer möglichst einfachen Herleitung des exakten Ausdrucks für die spontane Magnetisierung des zweidimensionalen Ising-Modells. Die Koppelung J wird für die Arbeit als homogen Isotrop angenommen und es werden periodische Randbedingungen festgelegt. Die Idee für diesen einfacheren Zugang geht schließlich auf die Arbeiten von Stuart Samuels zurück, der 1980 das Ising-Modell mithilfe von Graßmann-Zahlen beschrieb und zeigte, dass sich so die auftauchenden Probleme statistischer oder graphischer Natur auf einfach handhabbare algebraische Ausdrücke abbilden lassen [3] [4]. Zudem bedient sich der hier dargestellte Beweis einer Idee aus dem Paper [2] von Elliot W. Montroll, Renfrey B. Potts und John C. Ward, welche das Ising-Modell mithilfe von Pfaffschen Determinanten 1962 untersuchten und denen es gelang die Spin-Spin-Korrelation für zwei beliebig weit entfernte Spins auf elegante Weise mit dem starken Szegő Grenzwertsatz zu berechnen.

Der Hauptteil der Arbeit gliedert sich in fünf Abschnitte. Die ersten zwei machen dabei circa ein Drittel der Arbeit aus und stellen die nötigen Grundlagen bereit. In Abschnitt 2 finden sich die physikalischen Grundlagen. Hier wird das Ising-Modell genauer beschrieben, die notwendigen Begriffe aus der Statistischen Physik erklärt und der in der Arbeit zentrale Begriff der spontanen Magnetisierung eingeführt, sowie der Zusammenhang zur Spin-Spin-Korrelation hergestellt. In Abschnitt 3 finden sich die mathematischen Grundlagen. Es wird die notwendige Theorie zu Graßmann-Zahlen, Graßmann-Algebra und Pfaffschen Determinanten aufbereitet. Für den mathematisch interessierten Leser finden sich im Anhang noch ein paar Beweise zu den allgemein bekannte Eigenschaften Pfaffscher Determinanten, welche ausschließlich im Rahmen der Graßmann-Zahlen geführt werden. Im Gegensatz zu Standardbeweisen, benötigen diese keine Vorwissen über die Spektraleigenschaften antisymmetrischer Matrizen.

In Abschnitt 4 wird die Berechnung der Zustandssumme des Ising-Modells als Problem des Zählens von geeigneten Graphen auf dem rechteckigen Gitter formuliert und dann mithilfe der Graßmann-Zahlen auf ein algebraisches Problem abgebildet. Zudem wird, über die Hochtemperatur-Darstellung des Ising-Modells, ein Ausdruck für die Spin-Spin-Korrelation abgeleitet, welcher sich als modifizierte Zustandssumme interpretieren lässt und somit das Problem der Magnetisierung auf die zuvor erwähnte algebraische Darstellung der Zustandssumme zurückführt. Abschließend wird noch eine diskrete Fouriertransformation der Graßmann-Zahlen auf dem Ising-Gitter besprochen, welche die Lösung des algebraischen Problems stark vereinfacht.

Das letzte Drittel der Arbeit machen die Abschnitte 5 und 6 aus. In Ersterem wird über den algebraischen Ausdruck für die Zustandssumme die Spin-Spin-Korrelation berechnet und der Übergang in den Thermodynamischen Limes vollzogen. Dieser Abschnitt ist der wohl technischste Teil der Arbeit. Hierbei wird insbesondere versucht die Definition der Pfaffschen Determinante in den Vordergrund zu rücken, anstatt diese mithilfe der Relation $\text{pf}(\mathbf{A})^2 = \det(\mathbf{A})$ auszuwerten. Dieser Zugang erweist sich als elegant und verhindert zudem Vorzeichenprobleme. In Abschnitt 6 wird letztlich die Magnetisierung über die Korrelation zweier beliebig weit entfernter Spins berechnet. Um den hier benötigten Grenzübergang elegant zu vollziehen kommt der starke Grenzwertsatz von Szegő zum Einsatz. Anhand der Magnetisierung wird das kritische Verhalten und der Phasenübergang des zweidimensionalen Ising-Gitters identifiziert, sowie die kritische Temperatur T_C bestimmt.

In Abschnitt 7 findet sich dann eine abschließende Analyse des Beweises sowie eine Diskussion weiterer Anwendungsmöglichkeiten für die hier verwendeten Methoden.

1.1. Bemerkung zur Notation

In der Arbeit werden Vektoren η und Matrizen \mathbf{A} jeweils in “Boldface” geschrieben. Die Komponenten werden dann mit dem selben Buchstaben und einem tiefgestellten Index bezeichnet, zum Beispiel A_{ij} . Jedoch sind nicht alle indizierten Größen Einträge eines Vektors oder einer Matrix, wie zum Beispiel die klassischen Zufallsvariablen σ_i . Lineare und bilineare Abbildungen werden immer mit einem Großbuchstaben bezeichnet und die zugehörige darstellende Matrix wird dem selben Buchstaben in “Boldface” notiert. Speziell Permutation werden immer mit P und die zugehörige Permutationsmatrix mit \mathbf{P} bezeichnet.

2. Grundlagen

2.1. Ferromagnetisches Ising-Modell

Dem Ising-Modell liegt die Vorstellung eines endlichen Gitters zugrunde, auf dessen Gitterpunkten permanente magnetische Momente μ_i lokalisiert sind. Diese sind alle entlang der selben Achse ausgerichtet, die Orientierung ist jedoch zufällig. Dies ist zum Beispiel ein sehr stark vereinfachtes Modell für einen magnetischen Isolator. Es kann als halbwegs realistisches Modell betrachtet werden, falls das Material eine stark uniaxiale Symmetrie aufweist, da dann eine Richtung für die magnetischen Momente im Material ausgezeichnet ist [1]. Die magnetischen Momente können dabei zum Beispiel von nicht vollbesetzten Hüllen der, an den Gitterplätzen lokalisierten, Atomen eines Kristalls herrühren. In Anlehnung daran werden die magnetische Momente über $\mu_i = \mu\sigma_i$ mit Spin-Variablen $\sigma_i \in \{-1, 1\}$ in Verbindung gebracht, welche als klassische Zufalls-Variablen mit zwei möglichen Einstellungen betrachtet werden. Das als Ising-Modell bekannte System wird dann durch die in (2.1) angegebene Hamiltonfunktion beschrieben. Betrachtet man ein Gitter mit N Gitterpunkten, so gibt es insgesamt 2^N verschiedenen Konfigurationen welche die Gesamtheit aller Spin-Variablen einnehmen kann. Als klassische Beschreibung, eines eigentlich quantenmechanischen Systems, ist die Hamiltonfunktion diskret und kann höchstens 2^N verschiedene Werte annehmen.

$$H_{\text{Ising}}(\sigma_1, \dots, \sigma_N) = - \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N J_{i,j} \sigma_i \sigma_j - \mu H_0 \sum_i \sigma_i \quad (2.1)$$

Die Größen $J_{i,j}$ werden als Austausch-Integrale bezeichnet. Sie beschreiben den Energieanteil, der aus der gegenseitigen Wechselwirkungen des i -ten und j -ten magnetischen Moments resultiert. Zu dieser Austauschenergie tragen im allgemeinen primär quantenmechanische Effekte bei, welche aus dem Zusammenspiel von Orts- und Spin-Wellenfunktion der Elektronen resultieren. Die erste Summe in (2.1) beschreibt somit die mit der Spin-Spin-Wechselwirkung in Verbindung gebrachten Energieanteil. Ist $J_{i,j}$ positiv, so führt eine parallele Spinausrichtung an den Gitterpunkten x_i und x_j zu einer Absenkung der Gesamtenergie und eine antiparallele Spinausrichtung zu einer Erhöhung. Ist $J_{i,j}$ negativ, so verhält es sich genau umgekehrt. Wechselwirkungen von magnetischen Momenten mit sich selbst sollen ausgeschlossen werden, also $\forall i : J_{i,i} = 0$.

Die zweite Summe in (2.1) beschreibt den Anteil der Energie, welcher durch Anlegen eines externen Magnetfeldes H_0 an das Modell-System entsteht. Für eine detaillierte Herleitung des quantenmechanischen Ising Hamiltonoperators und eine ausführlichere Beschreibung siehe auch [5].

Für den Rest der Arbeit sollen weitere Vereinfachungen vereinbart werden:

- i) Isotropie und Homogenität des Modells, d.h. $\forall i \neq j : J_{i,j} = J_{j,i} = J_i = J$
- ii) Nur nächste Nachbar Wechselwirkung, d.h. $\forall i, j : J_{i,j} = 0$ für $|i - j| > 1$
- iii) Kein externes Magnetfeld, d.h. $H_0 = 0$

Zudem beschränkt sich die Arbeit auf ein zweidimensionales Gitter, welches o.B.d.A in der x-y-Ebene liegen soll. Die Einstellungen der Spins kann man sich dann als Ausrichtung der magnetischen Momente entlang der z-Achse vorstellen. Zudem soll $J > 0$ gelten, um überhaupt eine spontane Magnetisierung erwarten zu können. Ein solches Ising-System, bei dem alle Austausch-Integrale nicht negativ sind, bezeichnet man auch als ferromagnetisch. Die Hamiltonfunktion, welche das System für ein quadratisches Gitter mit Seitenlänge $2M + 1$ und somit $N = (2M + 1)^2$ Gitterpunkten beschreibt, ist im Folgenden angegeben.

2d Ising-Modell ohne externes Magnetfeld

$$H(\sigma_1, \dots, \sigma_N) = -J \sum_{(i,j)} \sigma_i \sigma_j \quad (2.2)$$

$$= -J \sum_{x=-M}^M \sum_{y=-M}^M \sigma_{x,y} \sigma_{x+1,y} + \sigma_{x,y} \sigma_{x,y+1} \quad (2.3)$$

Die Summation in (2.2) läuft dabei über alle $2N$ Paare nächster Nachbarn auf dem Gitter. Diese Notation soll für die gesamte Arbeit vereinbart werden.

$$\sum_{(i,j)} \text{ bzw. } \prod_{(i,j)} \iff \begin{array}{l} \text{Summe bzw. Produkt über alle Paare} \\ \text{nächster Nachbarn auf dem Gitter} \end{array} \quad (2.4)$$

Im folgenden wird das Gitter auf zwei unterschiedliche Weisen beschrieben. Einerseits wird das Gitters über eine geeignete Nummerierung der Gitterpunkte und der Angabe des Indexes j beschrieben. Dies wird zum Beispiel bei der Beschreibung nächster Nachbar Paare auf dem Gitter, siehe (2.2), benutzt. Die Nummerierung der Gitterpunkte ist vorerst beliebig, wird aber zu einem späteren Zeitpunkt genauer festgelegt werden. Andererseits wird zur Beschreibung des Gitters eine explizite Angabe der Koordinaten $\mathbf{x} = (x, y)$ der Gitterpunkte in der Ebene, wie in (2.3), benutzt. Insbesondere gehen diese beiden Arten der Beschreibung durch die Zuordnung $j \rightarrow \mathbf{x}_j$ bzw. $\sigma_j = \sigma_{\mathbf{x}_j}$ fließend ineinander über. Davon wird in der Arbeit mehrmals Gebrauch gemacht werden. Die Darstellung in (2.3) wirft letztlich die Frage nach den Randbedingungen auf. Es werden periodische Randbedingungen gemäß (2.5) festgelegt.

$$\begin{aligned} \forall y : \sigma_{M+1,y} &= \sigma_{-M,y} \\ \forall x : \sigma_{x,M+1} &= \sigma_{x,-M} \end{aligned} \quad (2.5)$$

2.2. Elemente der Statistischen Mechanik

Das im vorherigen Abschnitt beschriebene Ising-Gitter dient nun als statistisches Assemble von N Teilchen, beschrieben durch die Hamiltonfunktion (2.2). Wir gehen davon aus, dass das System in thermischen Kontakt mit einem Wärmebad konstanter Temperatur T steht. Zudem gilt dass sowohl die Ausdehnung V , als auch die an Anzahl N der an den Gitterplätzen lokalisierten Momente, konstant sind für jedes Ising-Gitter. Das Assemble kann aus Sicht der

statistischen Physik somit als sogenannte kanonische Gesamtheit beschrieben werden. Die Berechnung vieler Größen solcher Systeme können durch die Berechnung der Zustandssumme Z und Erwartungswerte bzw. Korrelationen $\langle \cdot \rangle$ berechnet werden. Die Zustandssumme ist dabei gemäß

$$Z(T, N, V) = \sum_{\{S\}} e^{-\beta H(S)} \quad (2.6)$$

definiert, wobei der Faktor $\beta = \beta(T) = \frac{1}{k_B T}$ eingeführt wurde, welcher die Einheit einer reziproken Energie hat. k_B ist hierbei die Boltzmann-Konstante. Die Summation erfolgt über die Menge aller möglichen Spinkonfigurationen des Systems, geschrieben als $\{S\} = \{S = (\sigma_1, \sigma_2, \dots, \sigma_N) \mid \forall i : \sigma_i \in \{-1, 1\}\}$. Die Wahrscheinlichkeit, dass eine Konfiguration S eingenommen wird, ist dann durch

$$P(S) = \frac{1}{Z} e^{-\beta H(S)} \quad (2.7)$$

gegeben. Die Spin-Spin-Korrelation ist der Erwartungswert für das Produkt zweier Spinvariablen und ist gemäß

$$\langle \sigma_p \sigma_q \rangle_{T, N, V} = \frac{1}{Z} \sum_{\{S\}} e^{-\beta H(S)} \sigma_p(S) \sigma_q(S) \quad (2.8)$$

definiert. [6] Um das System mit den Mitteln der Statistischen Physik auf Phasenübergänge untersuchen zu können, muss das Ising-Modell im sogenannten Thermodynamik Limes untersucht werden. Dazu wird eine entsprechende Größe, wie die freie Energie, für ein System endlicher Ausdehnung V und Teilchenzahl N berechnet und anschließend mithilfe des Grenzübergangs (2.9) auf ein unendliches System extrapoliert.

$$\lim_{V, N \rightarrow \infty}^* \iff \begin{array}{l} N \rightarrow \infty \\ V \rightarrow \infty \\ n = N/V = \text{konst.} < \infty \end{array} \quad (2.9)$$

Der Übergang in den Thermodynamischen Limes ist notwendig, um Phasenübergänge erkennen zu können, da diese sich als Diskontinuität, Singularität oder Nicht-Analytizität eines Thermodynamischen Potenzials, wie der Freien Energie, bemerkbar machen. Für endliche Systeme sind diese Potenziale aber immer analytisch. Für das unendlich große System können nur Größen pro Volumen oder Teilchen sinnvoll betrachtet werden. Die Freie Energie pro Teilchen f lässt sich z.B. als Thermodynamischer Limes der Freien Energien F_N endlicher Systemen mit Teilchenzahl N ausdrücken. F_N wiederum kann mit der Zustandssumme des endlichen Systems berechnet werden. [1]

$$f(T, n = \frac{N}{V}) = \lim_{V, N \rightarrow \infty}^* \frac{F_N}{N} = \lim_{V, N \rightarrow \infty}^* \frac{-k_B T}{N} \ln(Z)(T, V, N) \quad (2.10)$$

2.3. Spontane Magnetisierung

Abschließend soll noch die Definition des Begriffs der spontane Magnetisierung besprochen werden. Die Magnetisierung \mathcal{M} eines magnetischen Festkörpers wird normalerweise als das mittlere magnetische Moment pro Volumen definiert. Für ein endliches Ising-Gitter Λ_N ergibt sich

$$\mathcal{M}(N, T, V, H_0) = \frac{1}{V} \left\langle \mu \sum_i \sigma_i \right\rangle_{\Lambda_N, H_0} = \frac{\mu N}{V} \langle \sigma_0 \rangle_{\Lambda_N, H_0} = n\mu \langle \sigma_0 \rangle_{\Lambda_N, H_0} \quad (2.11)$$

als eine anschauliche Definition der Magnetisierung des Ising-Systems. Dabei wurde die, durch die angenommene Homogenität und Periodizität des periodischen Gitters implizierte, Translationsinvarianz der Erwartungswerte benutzt. Die Magnetisierung eines beliebig großen Systems ergibt sich letztlich durch Extrapolation mithilfe des Thermodynamischen Limes. Zur Notation sei gesagt dass Λ_N andeutet dass ein endliches System mit N Teilchen betrachtet wird und tiefgestelltes H_0 verweist auf die Anwesenheit eines externen Magnetfeldes $H_0 > 0$. Als spontane Magnetisierung \mathcal{M}_S wird nun die Magnetisierung eines Festkörpers bei verschwindendem externen Magnetfeld bezeichnet.

$$\mathcal{M}_S(T) = \lim_{H_0 \rightarrow 0} \mathcal{M} = \lim_{H_0 \rightarrow 0} \lim_{V, N \rightarrow \infty}^* \mathcal{M}(T, N, V, H_0) = n\mu \lim_{H_0 \rightarrow 0} \lim_{V, N \rightarrow \infty}^* \langle \sigma_0 \rangle_{\Lambda_N, H_0} \quad (2.12)$$

Die Definition in (2.12) wirft dabei jedoch zwei Probleme für die Berechnung der spontanen Magnetisierung für das hier untersuchte Ising-System auf:

- i) Die Grenzprozesse in (2.12) lassen sich im Allgemeinen nicht vertauschen. Somit kann diese Definition für die spontane Magnetisierung möglicherweise nicht angewandt werden. Für das untersuchte System wurde schließlich $H_0 = 0$ festgelegt.
- ii) Es konnte bislang keine analytische Berechnung für $\langle \sigma_0 \rangle$ gefunden werden. (Zumindest ist eine solche dem Autor nicht bekannt).

Um diese Probleme zu umgehen, soll die spontane Magnetisierung stattdessen über die langreichweitige Spin-Spin-Korrelation (2.13) gemäß (2.14) definiert werden.

Definition der spontanen Magnetisierung

$$l^* = \lim_{\|\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j\|_1 \rightarrow \infty} \lim_{V, N \rightarrow \infty}^* \sqrt{\langle \sigma_i \sigma_j \rangle_{\Lambda_N}} \quad (2.13)$$

$$\mathcal{M}_S = n\mu l^* \quad (2.14)$$

Dass dies tatsächlich eine äquivalente Definition für die spontane Magnetisierung darstellt, wird zum Beispiel in einer Arbeit von Anders Martin-Löf [7] bewiesen. Das Resultat seiner Arbeit kann dabei wie folgt zusammengefasst werden.

Der Grenzwert $\lim_{V,N \rightarrow \infty}^* \langle \sigma_i \sigma_j \rangle_{\Lambda_N}$ existiert und für $e^{-2J\beta} < \frac{1}{3}$ folgt dass $n\mu l^* = M_S$ für das 2D-Ising Gitter, unabhängig von den folgenden Randbedingungen :

- + Das Gitter wird von Spins mit konstantem Wert 1 eingeschlossen
- Das Gitter wird von Spins mit konstantem Wert -1 eingeschlossen
- f Es gilt $J_{i,j} = 0$ für $i > M$ oder $j > M$ (freier Rand)
- t Das Gitter hat die Topologie eines Torus (periodische Randbedingungen)

Wobei M_S in diesem Zusammenhang gemäß (2.12) definiert ist.

Dabei entspricht die letzte Bedingung t der hier verwendeten Randbedingung.

3. Antikommutierende Variablen und Graßmann Algebra

Um eine möglichst einfache, gut brauchbare Darstellung für die Zustandssumme des Ising-Modells zu finden, werden die sogenannten Graßmann-Zahlen eingeführt. Als Grundlage für die Berechnung in den folgenden Kapiteln, sollen in diesem Abschnitt die wichtigsten abstrakten algebraischen Eigenschaften und Operationen für diese Zahlen vorgestellt werden. Als mögliches Nachschlagewerk empfiehlt sich [8].

3.1. Graßmann-Variablen und Graßmann-Funktionen

Als Graßmann-Algebra wird eine assoziative \mathbb{C} -Algebra $(\mathcal{A}, \cdot, +, \wedge)$ mit Eins bezeichnet, welche von einer Familie von Generatoren $(\eta_1, \eta_2, \dots, \eta_n)$ erzeugt wird, welche die Eigenschaft

$$\forall i, j \in \{1, \dots, n\} : \eta_i \wedge \eta_j = -\eta_j \wedge \eta_i \quad (3.1)$$

erfüllen. Die Generatoren $(\eta_i)_{i=1}^n$ sind linear unabhängig und werden als Graßmann-Variablen bezeichnet. Fortan soll in der Notation, wie es auch in der Literatur üblich ist, die explizite Unterscheidung von \wedge und \cdot in der Notation weggelassen werden. Für eine Familie von n Graßmann-Variablen bildet \mathcal{A} einen 2^n -dimensionalen Vektorraum. Eine mögliche Basis \mathcal{B} ist dabei durch die Monome (3.2) in den Graßmann-Variablen bis zum Grad n gegeben, wo p den Grad des Monomes bezeichnet.

$$\mathcal{B} = \{\eta_{i_1} \eta_{i_2} \cdots \eta_{i_p} \mid i_1 < i_2 < \dots < i_p \text{ und } p \leq n\} \quad (3.2)$$

Die Variablen sind für die Monome immer in aufsteigender Reihenfolge angegeben. Im folgenden sei ein Beispiele für $n = 3$ angegeben. Für $p = 0$ wird das Eins-Element der Algebra als zugehöriges Monom definiert.

$$\begin{aligned} p = 0 & : 1 \\ p = 1 & : \eta_1, \eta_2, \eta_3 \\ p = 2 & : \eta_1 \eta_2, \eta_1 \eta_3, \eta_2 \eta_3 \\ p = 3 & : \eta_1 \eta_2 \eta_3 \end{aligned}$$

Ein Element $f \in \mathcal{A}$ kann dann eindeutig in der Basis als Polynom maximal n -ten Grades in den Graßmann-Variablen dargestellt werden [8]. f heißt eine Graßmann-Zahl oder, aufgrund der Polynomdarstellung, auch Graßmann-Funktion. Die historisch begründete Bezeichnung als Variable oder Funktion ist dabei ein wenig irreführend, da sowohl die Generatoren als auch die Funktionen fixe Elemente der selben Algebra \mathcal{A} sind und keine variablen Eigenschaften aufweisen. Jede Graßmann-Funktion lässt sich als eindeutige Linearkombination der Monome darstellen, wodurch die allgemeinste Graßmann-Funktion durch

$$f(\eta_1, \dots, \eta_n) = f_0 + \sum_i f_i \eta_i + \sum_{i_1 < i_2} f_{i_1, i_2} \eta_{i_1} \eta_{i_2} + \sum_{i_1 < i_2 < i_3} \dots + f_{1, 2, \dots, n} \eta_1 \eta_2 \dots \eta_n \quad (3.3)$$

gegeben ist. Aus (3.3) ist zudem auch ersichtlich, dass sich jede Graßmann-Funktion für jede Variable gemäß

$$\begin{aligned} f(\eta_1, \dots, \eta_n) &= \bar{f}(\eta_1, \dots, \eta_{k-1}, \eta_{k+1}, \dots, \eta_n) + \eta_k f'(\eta_1, \dots, \eta_{k-1}, \eta_{k+1}, \dots, \eta_n) \\ &= \bar{f} + \eta_k f' \end{aligned} \quad (3.4)$$

in eindeutiger Weise zerlegen lässt, sodass die Teile \bar{f} und f' nicht mehr von dieser Variable abhängen. [9] [10] Im Folgenden sind noch einige, leicht einsehbare Rechenregeln für die Monome gegeben. Für $p = 1$ ergibt sich der Spezialfall einzelner Graßmann-Variablen.

Seien ϕ_p und ψ_q zwei Monome vom Grad p bzw. q , so gilt:

$$\phi_p^2 = 0, \quad (3.5)$$

$$\phi_p \psi_q = \begin{cases} 0 & \text{für } p + q > n \\ (-1)^{pq} \psi_q \phi_p & \text{für } p + q \leq n \end{cases} \quad (3.6)$$

Die Reihendarstellungen von komplexen analytische Funktionen können benutzt werden, um Graßmann-Funktionen zu definieren. Aufgrund der Eigenschaften (3.5) brechen diese immer nach einer endlichen Anzahl von Termen ab. Dies ist im folgenden für die Exponentialfunktion vorgeführt.

$$f(\eta_1) = \exp(\eta_1) = 1 + \eta_1 + \frac{\eta_1^2}{2} + \dots = 1 + \eta_1 \quad (3.7)$$

Dies funktioniert für beliebige andere Graßmann-Zahlen und ist nicht auf die Generatoren der Algebra beschränkt. Es kann zum Beispiel ein beliebiges Monom eingesetzt werden, welches ja selbst eine Graßmann-Funktion der Generatoren ist.

$$f(\phi_p) = \exp(\phi_p) = 1 + \phi_p + \frac{\phi_p^2}{2} + \dots = 1 + \phi_p \quad (3.8)$$

Es ist jedoch darauf zu achten, dass sich diese Exponentialfunktion nicht immer verhält, wie man es von den Reellen Zahlen gewohnt ist. Seien dazu ϕ_p und ψ_q Monome in den Graßmann-Variablen vom Grad p und q ;

$$\begin{aligned}
f(\phi_p, \psi_q) &= \exp(\phi_p + \psi_q) \\
&= 1 + (\phi_p + \psi_q) + \frac{1}{2}(\phi_p + \psi_q)^2 + \dots \\
&= 1 + (\phi_p + \psi_q) + \frac{1}{2}(\phi_p^2 + \phi_p\psi_q + \psi_q\phi_p + \psi_q^2) + \dots \\
&= 1 + (\phi_p + \psi_q) + \frac{1}{2}(\phi_p\psi_q + \psi_q\phi_p), \tag{3.9}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\bar{f}(\phi_p, \psi_q) &= \exp(\phi_p) \exp(\psi_q) \\
&= (1 + \phi_p)(1 + \psi_q) \\
&= 1 + \phi_p + \psi_q + \phi_p\psi_q \tag{3.10}
\end{aligned}$$

Man erkennt mithilfe von (3.6) dass $f = \bar{f}$ für z.B. $p = q = 2$ gilt, nicht jedoch für $p = q = 1$.

3.2. Spur-Operation und Berezin-Integral

Als nächstes soll eine lineare Operation $\text{Sp} : \mathcal{A} \rightarrow \mathbb{C}$ eingeführt werden, welche als Spur einer Graßmann-Zahl bezeichnet wird. Dazu wird das sogenannte Berezin-Integral für Graßmann-Variablen verwendet. Dieses Integral ist als eine lineare Operation $\int : \mathcal{A} \rightarrow \mathcal{A}$ zu verstehen und hat nichts, außer einigen algebraischen Eigenschaften, mit dem Lebesgue'schen oder Riemann'schen Integralbegriff zu tun. Benutzt man die Zerlegung (3.4), so definiert die Vorschrift

$$\int d\eta_i f = \int d\eta_i (\bar{f} + \eta_i f') = f' \tag{3.11}$$

das Berezin-Integral in einer Graßmann-Variablen auf ganz \mathcal{A} in eindeutiger Weise. Als Beispiel ist im folgenden diese Integration in der 2-ten Variablen für eine Graßmann Funktion f auf einer Algebra mit 2 Generatoren η_1, η_2 vorgeführt.

$$\begin{aligned}
\int d\eta_2 f(\eta_1, \eta_2, \eta_n) &= \int d\eta_2 (f_0 + f_1\eta_1 + f_2\eta_2 + f_{1,2}\eta_1\eta_2) \\
&= \int d\eta_2 ((f_0 + f_1\eta_1) + \eta_2(f_2 - f_{1,2}\eta_1)) \\
&= f_2 - f_{1,2}\eta_1 \tag{3.12}
\end{aligned}$$

Dabei ist zu beachten, dass das negative Vorzeichen von $f_{1,2}$ von den antikommutierenden Eigenschaften der Variablen bei der Zerlegung in \bar{f} und f' herrührt. In (3.11) und (3.12) fällt auf, dass die Berezin-Integraloperation sich wie eine algebraische Ableitungsvorschrift für Polynome verhält. Einige leicht einzusehenden Eigenschaften des Berezin-Integrals sind in den

folgenden Formeln zusammengefasst. Oftmals werden diese als definierende Eigenschaften heran gezogen und daraus die Vorschrift (3.11) abgeleitet.

$$\int d\eta_i 1 = 0 \quad (3.13)$$

$$\int d\eta_i \eta_j = \delta_{i,j} \quad (3.14)$$

$$\int d\eta_i \eta_j \eta_k = \delta_{i,j} \eta_k = -\delta_{i,k} \eta_j \quad (3.15)$$

Ein Berezin-Integral über mehrere Variablen ist dann über die Hintereinanderausführung der Integrale bezüglich einzelnen Variablen definiert.

$$\iint d\eta_i d\eta_j f := \int d\eta_i \left(\int d\eta_j f \right) \quad (3.16)$$

Aus den antikommutativen Eigenschaften der Graßmann-Variablen und der Definition des Integrals folgt damit auch eine Antikommutions-Relation für die Mehrfachintegrale. Das Vorzeichen hängt dabei dann von der Integrationsreihenfolge ab. Dies wird für Mehrfachintegral durch die Reihenfolge der Variablen im “Integrationsmaß” festgehalten.

$$\iint d\eta_i d\eta_j f = - \iint d\eta_j d\eta_i f \quad (3.17)$$

Integriert man dann in aufsteigender Reihenfolge über alle Variablen so ergibt sich der Koeffizient des höchsten Monoms in der Basisdarstellung von f . Dieser Koeffizient liegt zudem in \mathbb{C} . Durch ein derartiges Berezin-Integral wird die Spur-Operation definiert.

Definition: Spur-Operation

$$\forall f \in \mathcal{A} : \quad \text{Sp}(f) := \int \cdots \int d\eta_n d\eta_{n-1} \cdots d\eta_1 f = f_{1,2,\dots,n} \quad (3.18)$$

Nun soll das Verhalten der Spur-Operation unter einer linearen Variablensubstitution,

$$\boldsymbol{\eta}(\boldsymbol{\theta}) = \boldsymbol{M} \boldsymbol{\theta} \quad (3.19)$$

$$\eta_i(\theta_1, \dots, \theta_n) = \sum_{j=1}^n M_{i,j} \theta_j \quad (3.20)$$

untersucht werden. Ist \boldsymbol{M} regulär, so bildet eine solche Transformation eine Familie $(\theta_i)_{i=1}^n$ von Graßmann-Variablen auf eine Familie $(\eta_i)_{i=1}^n$ ab, die ebenfalls Generatoren der Algebra ab. Dies ist dadurch zu erkennen, dass invertierbare Abbildungen die lineare Unabhängigkeit erhalten und auch die Eigenschaft der Antikommutativität nach

$$\begin{aligned} \eta_i \eta_j &= \left(\sum_{k=1}^n M_{i,k} \theta_k \right) \left(\sum_{l=1}^n M_{j,l} \theta_l \right) = \sum_{k=1}^n \sum_{l=1}^n M_{i,k} M_{j,l} \theta_k \theta_l \\ &= \sum_{k=1}^n \sum_{l=1}^n M_{i,k} M_{j,l} (-\theta_l \theta_k) = - \sum_{k=1}^n \sum_{l=1}^n M_{j,l} M_{i,k} \theta_l \theta_k = -\eta_j \eta_i \end{aligned}$$

erhalten bleibt. Die beiden Familien von Graßmann-Variablen sind äquivalent in der Hinsicht, dass alle bislang hergeleiteten Eigenschaften für jede Familie von Generatoren gelten. Für die Monome gilt, dass jedes Monom vom Grad p auf ein Polynom vom gleichen Grad in den neuen Graßmann-Variablen abgebildet wird,

$$\eta_{i_1}, \dots, \eta_{i_p} = \sum_{j_1=1}^n \cdots \sum_{j_p=1}^n M_{i_1, j_1} \cdots M_{i_p, j_p} \theta_{j_1} \cdots \theta_{j_p}$$

Durch den Versuch ein beliebiges Produkt von Graßmann-Variablen durch paarweise Vertauschung in ihre natürliche Reihenfolge umzuordnen, macht man sich leicht den Zusammenhang

$$\theta_{j_1} \cdots \theta_{j_p} = \epsilon_{j_1, \dots, j_n} \theta_1 \cdots \theta_n \quad (3.21)$$

mit dem Levi-Civita-Symbol (Siehe Appendix C) klar. Für eine beliebige Graßmann Funktion ergibt sich dann

$$\begin{aligned} f(\eta(\theta_1, \dots, \theta_n)) &= \bar{f} + f_{1, \dots, n} \eta_1(\theta_1, \dots, \theta_n) \cdots \eta_n(\theta_1, \dots, \theta_n) \\ &= \bar{f} + f_{1, \dots, n} \sum_{j_1=1}^n \cdots \sum_{j_n=1}^n M_{1, j_1} \cdots M_{n, j_n} \theta_{j_1} \cdots \theta_{j_n} \\ &= \bar{f} + f_{1, \dots, n} \left(\sum_{j_1=1}^n \cdots \sum_{j_n=1}^n M_{1, j_1} \cdots M_{n, j_n} \epsilon_{j_1, \dots, j_n} \right) \theta_1 \cdots \theta_n \\ &= \bar{f} + f_{1, \dots, n} \det(M) \theta_1 \cdots \theta_n \end{aligned} \quad (3.22)$$

unter der Transformation. Dabei ist \bar{f} ein Polynom von höchstens Grad $n-1$. Mit der Notation $D_\eta = d\eta_n d\eta_{n-1} \cdots d\eta_1$ und unter der Beachtung der Definition (3.18) der Spur-Operation erhält man die Relation (3.23), welche zur Transformationsformel für Riemannintegrale ähnlich ist. Im Gegensatz zum Riemann-Integral ist jedoch die Determinante der Transformationsmatrix M zu bilden, nicht die der Inversen M^{-1} .

Für Variablentransformationen $\eta(\theta) = M\theta$ gilt:

$$\int D_\theta f(\eta(\theta)) = \det(M) \int D_\eta f(\eta) \quad (3.23)$$

$$\text{Sp}(f(M\theta)) = \det(M) \text{Sp}(f(\eta)) \quad (3.24)$$

3.3. Gauß-Berezin-Integrale und Pfaffsche Determinante

In diesem Abschnitt sollen Berezin-Integrale der Form

$$\int \cdots \int d\eta_n d\eta_{n-1} \cdots d\eta_1 \exp\left(\frac{A(\boldsymbol{\eta}, \boldsymbol{\eta})}{2}\right) \quad (3.25)$$

$$A(\boldsymbol{\eta}, \boldsymbol{\eta}) = \boldsymbol{\eta}^T \mathbf{A} \boldsymbol{\eta} = \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n A_{i,j} \eta_i \eta_j \quad (3.26)$$

betrachtet werden, da diese immer wieder in der Arbeit auftauchen werden. Integrale dieses Typs sollen fortan als Gauß-Berezin-Integrale bezeichnet werden. Die Größe $A(\boldsymbol{\eta}, \boldsymbol{\eta})$ aus (3.26) wird als quadratische Wirkung in den Graßmann-Variablen oder als quadratische Graßmann-Wirkung bezeichnet. \mathbf{A} ist dabei die darstellende Matrix der Quadratischen Form bezüglich der Familie von Generatoren η_1, \dots, η_n . Die Graßmann-Funktion $e^{A/2}$ wird als Gauß-Graßmann-Dichte bezeichnet.

Die Matrix \mathbf{A}^T steht hierbei für die Transponierte von \mathbf{A} . Diese ist nicht zu verwechseln mit der adjungierten \mathbf{A}^\dagger . Eine mit diesen Integralen eng zusammenhängende Größe ist die sogenannte Pfaffsche Determinante $\text{pf}(\mathbf{A})$ einer antisymmetrischen Matrix. Für eine antisymmetrische Matrix \mathbf{A} der Größe $2n \times 2n$ ist diese gemäß

$$\text{pf}(\mathbf{A}) = \frac{1}{2^n n!} \sum_{P \in S_{2n}} \text{sign}(P) \prod_{i=1}^n A_{P(2i-1), P(2i)} \quad (3.27)$$

definiert. Für antisymmetrische quadratische Matrizen \mathbf{A} ungerader Dimension verschwindet $\text{pf}(\mathbf{A})$. Die Summation in (3.27) wird dabei über alle Permutationen P der Zahlen 1 bis $2n$ ausgeführt. S_{2n} bezeichnet die zugehörige Symmetrische Gruppe, also die Menge aller solcher Permutationen. Mit $\text{sign}(P)$ wird das Vorzeichen der Permutation P bezeichnet.

Für eine 2×2 bzw. eine 4×4 Matrix kann die Pfaff'sche Determinate leicht für den allgemeinen Fall explizit angegeben werden.

$$\text{pf} \begin{pmatrix} 0 & a \\ -a & 0 \end{pmatrix} = a \quad (3.28)$$

$$\text{pf} \begin{pmatrix} 0 & a & b & c \\ -a & 0 & d & e \\ -b & -d & 0 & f \\ -c & -e & -f & 0 \end{pmatrix} = af - be + dc$$

Es besteht der folgende Zusammenhang zwischen einem Gauß-Berezin-Integral und den Pfaffschen Determinanten.

Gauß-Berezin-Integrale

Für jede quadratische Graßmann-Wirkungen A , gibt es genau ein $\mathbf{A} \in \mathbb{C}^{n \times n}$ mit $\mathbf{A}^T = -\mathbf{A}$ sodass gilt :

$$A(\boldsymbol{\eta}, \boldsymbol{\eta}) = \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n A_{i,j} \eta_i \eta_j \quad (3.29)$$

Dann gilt für das zugehörige Gauß-Berezin-Integral der quadratischen Graßmann-Wirkung:

$$\text{Sp}(e^{A/2}) = \int \cdots \int d\eta_n d\eta_{n-1} \cdots d\eta_1 \exp\left(\frac{A(\boldsymbol{\eta}, \boldsymbol{\eta})}{2}\right) = \text{pf}(\mathbf{A}) \quad (3.30)$$

Zuerst soll gezeigt werden, dass jede quadratische Graßmann-Wirkung genau eine schief symmetrische darstellende Matrix besitzt. Dies kann man einsehen, indem man eine beliebige symmetrische Matrix \mathbf{B} betrachtet. Die durch \mathbf{B} definierte quadratische Wirkung B erweist sich dann, gemäß

$$\begin{aligned} B(\boldsymbol{\eta}, \boldsymbol{\eta}) &= \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n B_{i,j} \eta_i \eta_j = \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n \frac{1}{2} (B_{i,j} + B_{j,i}) \eta_i \eta_j \\ &= \frac{1}{2} \left(\sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n B_{i,j} \eta_i \eta_j - \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n B_{j,i} \eta_j \eta_i \right) = 0 \end{aligned} \quad (3.31)$$

als das Null-Element der Graßmann Algebra. Durch Aufteilen einer Matrix \mathbf{A} in einen Symmetrischen Anteil $\frac{\mathbf{A} + \mathbf{A}^T}{2}$ und einen antisymmetrischen Anteil $\frac{\mathbf{A} - \mathbf{A}^T}{2}$, lässt sich immer eine antisymmetrische darstellende Matrix finden. Diese ist dann eindeutig. Denn für zwei antisymmetrische darstellende Matrizen \mathbf{A} und \mathbf{B} der selben Wirkung A gilt

$$\sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n (A_{i,j} - B_{i,j}) \eta_i \eta_j = A(\boldsymbol{\eta}, \boldsymbol{\eta}) - A(\boldsymbol{\eta}, \boldsymbol{\eta}) = 0$$

Aufgrunder der linearen Unabhängigkeit der Monome $\eta_i \eta_j$ folgt dann aber, dass alle Koeffizienten verschwinden müssen und somit $\mathbf{A} = \mathbf{B}$.

Sei nun $\mathbf{A} \in \mathbb{C}^{2n \times 2n}$ die eindeutige, antisymmetrische darstellende Matrix einer quadratischen Graßmann-Wirkung A aus einer, von $2n$ Graßmann-Variablen erzeugten, Algebra. Um die Integration auszuführen, muss eine geeignete Polynom-Darstellung von $e^{A/2}$ berechnet werden.

Dazu wird die Definition der Exponentialfunktion als Potenzreihe benutzt.

$$\begin{aligned}
e^{A/2} &= \exp \left(\sum_{i=1}^{2n} \sum_{j=1}^{2n} \frac{A_{i,j}}{2} \eta_i \eta_j \right) = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{2^n n!} \left(\sum_{i=1}^{2n} \sum_{j=1}^{2n} A_{i,j} \eta_i \eta_j \right)^n \\
&= \frac{1}{2^n n!} \left(\sum_{i=1}^{2n} \sum_{j=1}^{2n} A_{i,j} \eta_i \eta_j \right)^n + \sum' \\
&= \frac{1}{2^n n!} \sum_{P \in S_{2n}} \prod_{i=1}^n A_{P(2i-1), P(2i)} \eta_{P(2i-1)} \eta_{P(2i)} + \sum'
\end{aligned} \tag{3.32}$$

Dabei steht \sum' für eine Summe von Monomen vom Grad höchstens $n-1$. Monome vom Grad echt größer als n verschwinden aufgrund der Eigenschaft (3.6). Die Summe \sum' verschwindet unter der Spurbildung. Unter Berücksichtigung der Linearität der Spuroperation folgt somit:

$$\begin{aligned}
\text{Sp}(e^{A/2}) &= \text{Sp} \left(\frac{1}{2^n n!} \sum_{P \in S_{2n}} \prod_{i=1}^n A_{P(2i-1), P(2i)} \eta_{P(2i-1)} \eta_{P(2i)} + \sum' \right) \\
&= \frac{1}{2^n n!} \sum_{P \in S_{2n}} \text{Sp} \left(\prod_{i=1}^n A_{P(2i-1), P(2i)} \eta_{P(2i-1)} \eta_{P(2i)} \right) + \text{Sp}(\sum') \\
&= \frac{1}{2^n n!} \sum_{P \in S_{2n}} \text{Sp} \left(\prod_{i=1}^n \eta_{P(2i-1)} \eta_{P(2i)} \right) \prod_{i=1}^n A_{P(2i-1), P(2i)}
\end{aligned} \tag{3.33}$$

Mithilfe von Glg. (3.21) lässt sich leicht für eine beliebige Permutation $P \in S_{2n}$ der Zusammenhang

$$\text{sign}(P) = \text{Sp}(\eta_{P(1)} \cdots \eta_{P(2n)}) = \text{Sp} \left(\prod_{i=1}^n \eta_{P(2i-1)} \eta_{P(2i)} \right) \tag{3.34}$$

einsehen. Mithilfe von (3.34) erkennt man in (3.33) die Definition der Pfaffschen Determinante. Somit ist die Aussage für $A \in \mathbb{C}^{2n \times 2n}$ gezeigt. Für $A \in \mathbb{C}^{2n+1 \times 2n+1}$ gilt $\text{Sp}(e^{A/2}) = 0$ (Beweis in Appendix B).

In (3.35) bis (3.40) sind noch einige wichtige Eigenschaften von Pfaffschen Determinanten festgehalten. Diese können Eigenständig über die Definition (3.27) der Pfaffschen Determinante bewiesen werden. Beweise können zum Beispiel in [11] gefunden werden. Die Definition über das Berezin-Integral bildet jedoch einen alternativen, sehr eleganten Zugang, um all diese Beweise zu führen. Hier sollen nur die Resultate zusammengefasst werden, die Beweise befinden sich in Appendix B.

Eigenschaften von Pfaffschen Determinanten

Sei $A \in \mathbb{C}^{2n \times 2n}$ eine schiefsymmetrische Matrix, dh $A^T = -A$. so gilt

$$\text{pf}(-A) = (-1)^n \text{pf}(A) \quad (3.35)$$

$$\text{pf}(A)^2 = \det(A) \quad (3.36)$$

Sei $M \in \mathbb{C}^{2n \times 2n}$ eine beliebige invertierbare Matrix. so gilt:

$$\text{pf}(M^T A M) = \det(M) \text{pf}(A) \quad (3.37)$$

Seien $A_i \in \mathbb{C}^{2n_i \times 2n_i}$ schiefsymmetrische Matrizen sodass sich A als Blockmatrix $A = \bigoplus_{i=1}^k A_i$ schreiben lässt, dann gilt:

$$\text{pf}\left(\bigoplus_{i=1}^k A_i\right) = \prod_{i=1}^k \text{pf}(A_i) \quad (3.38)$$

Ist $A \in \mathbb{C}^{2n \times 2n}$ invertierbar so gilt:

$$\text{pf}(A^{-1}) = (-1)^n \text{pf}(A)^{-1} = \text{pf}(-A)^{-1} \quad (3.39)$$

Sei $M \in \mathbb{C}^{n \times n}$ beliebig. So gilt

$$\text{pf}\begin{pmatrix} 0 & M \\ -M^T & 0 \end{pmatrix} = (-1)^{n(n-1)/2} \det(M) \quad (3.40)$$

3.4. Graßmann-Korrelationen

Zuletzt sollen Größen der Form

$$\langle f \rangle = \frac{\text{Sp}(e^{A/2} f(\eta_{i_1} \cdots \eta_{i_k}))}{\text{Sp}(e^{A/2})} \quad (3.41)$$

betrachtet werden. Diese sollen, in Anlehnung an die Wahrscheinlichkeitstheorie oder Statistische Physik, als Graßmann-Korrelationen bezeichnet werden. Während der Nenner in (3.41) über eine Pfaffsche Determinante berechnet werden kann, muss für den Zähler noch ein wenig Arbeit geleistet werden. Es soll nun ein expliziter Ausdruck für den Fall, dass f ein Monom in den Graßmann-Variablen ist, hergeleitet werden.

$$\langle \eta_{i_1} \cdots \eta_{i_k} \rangle = \frac{\text{Sp}(e^{A/2} \eta_{i_1} \cdots \eta_{i_k})}{\text{Sp}(e^{A/2})} \quad (3.42)$$

Die Korrelation verschwindet sobald eine Graßmann-Variable zwei mal vorkommt, da das Produkt dann die 0 ergibt. Es sei $P : \{1, \dots, n\} \mapsto \{i_1, \dots, i_k, j_1, \dots, j_{n-k}\}$ eine Permutation sodass $i_1 < i_2 < \cdots < i_k$ und $j_1 < j_2 < \cdots < j_{n-k}$ gilt. Im folgenden bezeichnet $A^{\#}$ die Matrix,

die man erhält, wenn man in \mathbf{A} die Zeilen und Spalten mit den Indices aus I streicht. $\mathbf{A}^{I'}$ bezeichnet die Matrix die man erhält wenn man in \mathbf{A} alle Zeilen streicht, deren Index nicht in I liegt und alle Spalten, deren Index doch in I liegen. $\mathbf{A}^{I'}$ und $\mathbf{A}^{I''}$ sind analog definiert. Um $\mathbf{A}^{I''}$ zu erhalten, streicht man z.b. alle Spalten und Zeilen von \mathbf{A} deren Index nicht in I liegt. Durch die Transformation der Matrix \mathbf{A} mithilfe von \mathbf{P} erhält man dann

$$\tilde{\mathbf{A}} = \mathbf{P}^T \mathbf{A} \mathbf{P} = \begin{pmatrix} \mathbf{A}^{I''} & \mathbf{A}^{I'} \\ \mathbf{A}^{I'} & \mathbf{A}^{I''} \end{pmatrix}. \quad (3.43)$$

Unter dieser Ähnlichkeitstransformation bleibt die Antisymmetrie der Matrix erhalten. Mit der Transformationsformel für das Berezin-Integral und der Definitionen $\boldsymbol{\theta} = \mathbf{P}\boldsymbol{\eta}$ bzw. $(\theta_1, \dots, \theta_n) = (\eta_{i_1}, \dots, \eta_{i_k}, \eta_{j_1}, \dots, \eta_{i_{n-k}})$ folgt für die Korrelation:

$$\begin{aligned} \langle \eta_{i_1} \cdots \eta_{i_k} \rangle &= \frac{\int \mathcal{D}\boldsymbol{\eta} \exp\left(\frac{1}{2} \boldsymbol{\eta}^T \mathbf{A} \boldsymbol{\eta}\right) \eta_{i_1} \cdots \eta_{i_k}}{\int \mathcal{D}\boldsymbol{\eta} \exp\left(\frac{1}{2} \boldsymbol{\eta}^T \mathbf{A} \boldsymbol{\eta}\right)} \\ &= \frac{\det(\mathbf{P}) \int \mathcal{D}\boldsymbol{\theta} \exp\left(\frac{1}{2} \boldsymbol{\theta}^T \tilde{\mathbf{A}} \boldsymbol{\theta}\right) \theta_1 \cdots \theta_k}{\det(\mathbf{P}) \int \mathcal{D}\boldsymbol{\theta} \exp\left(\frac{1}{2} \boldsymbol{\theta}^T \tilde{\mathbf{A}} \boldsymbol{\theta}\right)} \\ &= \frac{\int \mathcal{D}\boldsymbol{\theta} \exp\left(\frac{1}{2} \boldsymbol{\theta}^T \tilde{\mathbf{A}} \boldsymbol{\theta}\right) \theta_1 \cdots \theta_k}{\text{pf}(\tilde{\mathbf{A}})} \end{aligned} \quad (3.44)$$

Der Ausdruck in (3.44) kann weiter umgeformt werden, indem man den Integranden $e^{A/2} \theta_1 \cdots \theta_k$ faktorisiert und anschließend die Integration teilweise ausführt. Es sei $\mathcal{N} = \{1, \dots, n\} \times \{1, \dots, n\}$ die Indexmenge der Summation für die Matrix Darstellung (3.23) der quadratischen Graßmann-Wirkung. Die Mengen $\mathcal{J} = \{n-k+1, \dots, n\} \times \{n-k+1, \dots, n\}$ und $\mathcal{J}^c = \mathcal{N} \setminus \mathcal{J}$ bilden eine Partition von \mathcal{N} . Mit dieser Aufteilung der Indexmenge lässt sich der Integrand, unter Ausnutzung der Kommutativität von Paaren von Graßmann-Variablen, faktorisieren.

$$\begin{aligned} \exp\left(\frac{1}{2} \boldsymbol{\theta}^T \tilde{\mathbf{A}} \boldsymbol{\theta}\right) \theta_1 \cdots \theta_k &= \exp\left(\frac{1}{2} \sum_{(i,j) \in \mathcal{N}} \tilde{A}_{i,j} \theta_i \theta_j\right) \theta_1 \cdots \theta_k \\ &= \prod_{(i,j) \in \mathcal{N}} \exp\left(\frac{1}{2} \tilde{A}_{i,j} \theta_i \theta_j\right) \theta_1 \cdots \theta_k \\ &= \prod_{(i,j) \in \mathcal{J}} \exp\left(\frac{1}{2} \tilde{A}_{i,j} \theta_i \theta_j\right) \prod_{(i,j) \in \mathcal{J}^c} \left(1 + \frac{1}{2} \tilde{A}_{i,j} \theta_i \theta_j\right) \theta_1 \cdots \theta_k \\ &= \left(\prod_{(i,j) \in \mathcal{J}} \exp\left(\frac{1}{2} \tilde{A}_{i,j} \theta_i \theta_j\right) \right) \theta_1 \cdots \theta_k \end{aligned} \quad (3.45)$$

Dabei wurde in (3.45) verwendet, dass Quadrate von Graßmann-Variablen verschwinden, so dass im Multiplikant nur 1 einen Beitrag liefert. Der Multiplikator hängt nun nicht mehr von $\theta_1, \dots, \theta_k$ ab, sodass die Integration über $\theta_1 \cdots \theta_k$ vorgezogen werden kann.

$$\begin{aligned}
& \int d\theta_n \cdots d\theta_1 \exp\left(\frac{1}{2} \boldsymbol{\theta}^T \tilde{\mathbf{A}} \boldsymbol{\theta}\right) \theta_1 \cdots \theta_k \\
&= \int d\theta_n \cdots d\theta_1 \left(\prod_{(i,j) \in \mathcal{J}} \exp\left(\frac{1}{2} \tilde{A}_{i,j} \theta_i, \theta_j\right) \right) \theta_1 \cdots \theta_k \\
&= \int d\theta_n \cdots d\theta_{n-k+1} \left(\prod_{(i,j) \in \mathcal{J}} \exp\left(\frac{1}{2} \tilde{A}_{i,j} \theta_i, \theta_j\right) \right) \int d\theta_k \cdots \theta_1 \theta_1 \cdots \theta_k \\
&= \int d\theta_n \cdots d\theta_{n-k+1} \prod_{(i,j) \in \mathcal{J}} \exp\left(\frac{1}{2} \tilde{A}_{i,j} \theta_i, \theta_j\right) \\
&= \text{pf}(\mathbf{A}^{\#})
\end{aligned}$$

Für die Graßmann-Korrelationen ergibt sich somit der Zusammenhang

$$\langle \eta_{i_1} \cdots \eta_{i_k} \rangle = \frac{\text{pf}(\mathbf{A}^{\#})}{\text{pf}(\tilde{\mathbf{A}})} = \frac{\text{pf}(\mathbf{A}^{\#})}{\det(\mathbf{P}) \text{pf}(\mathbf{A})} \quad (3.46)$$

Als nächstes sollen nun Korrelationen von beliebigen Monomen in den Graßmann-Variablen auf Paarkorrelationen zurückgeführt werden. Als erster Schritt wird dazu die Matrix $\tilde{\mathbf{A}}$ wie in (3.47) faktorisiert.

$$\tilde{\mathbf{A}} = \begin{pmatrix} \mathbf{A}^{II} & \mathbf{A}^{I\#} \\ \mathbf{A}^{\#I} & \mathbf{A}^{\#} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \mathbb{1}_{k,k} & \mathbf{G} \\ 0 & \mathbb{1}_{n-k,n-k} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{B} & 0 \\ 0 & \mathbf{A}^{\#} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbb{1}_{k,k} & 0 \\ \mathbf{F} & \mathbb{1}_{n-k,n-k} \end{pmatrix} \quad (3.47)$$

Mit den Matrizen:

$$\begin{aligned}
\mathbf{B} &= \mathbf{A}^{II} - \mathbf{A}^{\#I} (\mathbf{A}^{\#})^{-1} \mathbf{A}^{I\#} \\
\mathbf{G} &= \mathbf{A}^{I\#} (\mathbf{A}^{\#})^{-1} \\
\mathbf{F} &= (\mathbf{A}^{\#})^{-1} \mathbf{A}^{\#I}
\end{aligned}$$

Dabei wird vorausgesetzt, dass der untere Diagonalblock $\mathbf{A}^{\#}$ invertierbar ist. Dies kann für nicht verschwindende Korrelationen vorausgesetzt werden. Denn wäre $\mathbf{A}^{\#}$ nicht invertierbar, so folgt $\text{pf}(\mathbf{A}^{\#})^2 = \det(\mathbf{A}^{\#}) = 0$ und somit wegen (3.46) dass die Korrelation verschwindet. Es kann auch vorausgesetzt werden, dass \mathbf{B} invertierbar ist. Denn wäre \mathbf{B} nicht invertierbar, so folgt aus (3.47) über den Produktsatz für Determinanten, dass $\tilde{\mathbf{A}}$ nicht invertierbar sein kann. Daraus folgt aber, dass $\text{pf}(\tilde{\mathbf{A}}) = 0$ und die Korrelation wäre somit nicht wohldefiniert. Für die Inverse Matrix $\tilde{\mathbf{A}}^{-1}$ ergibt sich dann mit

$$\tilde{\mathbf{A}}^{-1} = \begin{pmatrix} \mathbb{1}_{k,k} & 0 \\ -\mathbf{F} & \mathbb{1}_{n-k,n-k} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{B}^{-1} & 0 \\ 0 & (\mathbf{A}^{\#})^{-1} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbb{1}_{k,k} & -\mathbf{G} \\ 0 & \mathbb{1}_{n-k,n-k} \end{pmatrix} \quad (3.48)$$

eine analoge Formel, welche leicht durch Nachrechnen verifiziert werden kann. Aufgrund der Tatsache, dass Permutationen orthogonal sind, dh. $\mathbf{P}\mathbf{P}^T = \mathbf{P}^T\mathbf{P} = \mathbb{1}$, folgt aus $\mathbb{1} = \mathbf{P}^T\mathbf{A}^{-1}\mathbf{P}\mathbf{P}^T\mathbf{A}\mathbf{P}$ der Zusammenhang

$$\tilde{\mathbf{A}}^{-1} = \mathbf{P}^T \mathbf{A}^{-1} \mathbf{P} = \begin{pmatrix} (\mathbf{A}^{-1})^{II} & (\mathbf{A}^{-1})^{I\#} \\ (\mathbf{A}^{-1})^{I\#} & (\mathbf{A}^{-1})^{II} \end{pmatrix} \quad (3.49)$$

für die Inverse der Matrix $\tilde{\mathbf{A}}$. Daraus erkennt man mit (3.48) und (3.49), durch einfaches Nachrechnen, dass

$$(\mathbf{A}^{-1})^{II} = \begin{pmatrix} \mathbb{1}_{KK} & 0 \end{pmatrix} \tilde{\mathbf{A}}^{-1} \begin{pmatrix} \mathbb{1}_{KK} \\ 0 \end{pmatrix} = \mathbf{B}^{-1} \quad (3.50)$$

gilt. Aus der Antisymmetrie der Matrix $\tilde{\mathbf{A}}$ folgt $-\mathbf{A}^{II} = (\mathbf{A}^{I\#})^T$ und $(\mathbf{A}^{I\#})^T = -\mathbf{A}^{II}$ und damit $\mathbf{G}^T = \mathbf{F}$.

$$\begin{aligned} \mathbf{G}^T &= (\mathbf{A}^{I\#} (\mathbf{A}^{I\#})^{-1})^T = ((\mathbf{A}^{I\#})^{-1})^T (\mathbf{A}^{I\#})^T \\ &= -((\mathbf{A}^{I\#})^T)^{-1} \mathbf{A}^{II} = (\mathbf{A}^{II})^{-1} \mathbf{A}^{II} = \mathbf{F} \end{aligned}$$

Mithilfe der Transformationsformel (3.37) und der Diagonalblockformel für Pfaffsche Determinanten (3.38) folgt:

$$\text{pf}(\tilde{\mathbf{A}}) = \det \begin{pmatrix} \mathbb{1}_{k,k} & 0 \\ \mathbf{F} & \mathbb{1}_{n-k,n-k} \end{pmatrix} \text{pf} \begin{pmatrix} \mathbf{B} & 0 \\ 0 & \mathbf{A}^{II} \end{pmatrix} = \text{pf}(\mathbf{B}) \text{pf}(\mathbf{A}^{II})$$

Unter Ausnutzung der Formel (3.39) für die Pfaffsche Determinanten der Inversen Matrix und Gleichung (3.50) ergibt sich letztlich:

$$\langle \eta_{i_1} \cdots \eta_{i_k} \rangle = \frac{\text{pf}(\mathbf{A}^{I\#})}{\text{pf}(\tilde{\mathbf{A}})} = \text{pf}(\mathbf{B})^{-1} = \text{pf}(-(\mathbf{B})^{-1}) = \text{pf}(-(\mathbf{A}^{-1})^{II})$$

Die Berechnung der Korrelationen lässt sich also wie folgt zusammenfassen.

Graßmann-Korrelationen von Monomen

Sei \mathbf{A} die antisymmetrische Matrix, welche die Graßmann-Dichte $e^{A/2}$ definiert. Dann gilt:

$$\langle \eta_{i_1} \cdots \eta_{i_k} \rangle = \begin{cases} 0 & \text{wenn } \det(\mathbf{A}^{I\#}) = 0 \\ \text{pf}(-(\mathbf{A}^{-1})^{II}) & \text{sonst} \end{cases} \quad (3.51)$$

Dabei sind $\mathbf{A}^{I\#}$ bzw. \mathbf{A}^{II} die Matrizen die man durch Streichen aller Zeilen und Spalten mit Indices in I bzw. nicht in I erhält.

Betrachtet man die Indizierung $I = (i, j)$ so folgt

$$\langle \eta_i \eta_j \rangle = \text{pf}(-(\mathbf{A}^{-1})^{II}) = \text{pf} \left(- \begin{pmatrix} 0 & (\mathbf{A}^{-1})_{i,j} \\ (\mathbf{A}^{-1})_{j,i} & 0 \end{pmatrix} \right) = -(\mathbf{A}^{-1})_{i,j} = -(\mathbf{A}^{-1})_{i,j}$$

für Paar-Korrelationen. Dadurch kann die Korrelation von beliebig vielen Variablen auf die Berechnung von Paar-Korrelationen zurückgeführt werden.

Berechnung von Monom Korrelation mit Paar-Korrelationen

Sei M die Matrix mit Einträgen $M_{j,l} = \langle \eta_{i_j} \eta_{i_l} \rangle$ so gilt:

$$\langle \eta_{i_1} \cdots \eta_{i_k} \rangle = \text{pf}(M) \quad (3.52)$$

4. Reformulierung des Ising-Modells

Dieser Abschnitt bildet den Hauptteil der Arbeit. Es wird sich herausstellen, dass die gesuchte Größe zu Berechnung der Magnetisierung, die Spin-Spin-Korrelation, mithilfe der Zustandssumme Z des Ising-Modells ausgedrückt werden kann. Das zentrale Ziel dieses Abschnitts ist es die Zustandssumme Z als Spur einer geeigneten Gauß-Graßmann-Dichte zu schreiben. Denn dann lassen sich Zustandssumme und Spin-Spin-Korrelation mit den in Abschnitt 3 erarbeiteten Mitteln berechnen. Um diese Reformulierung zu erreichen wird ein Zwischenschritt benötigt, bei dem das Ising-Modell mit einer sogenannten Hochtemperatur-Darstellung auf ein graphisch kombinatorisches Problem abgebildet wird. Dieses kann dann mithilfe der Graßmann-Variablen behandelt werden. Diese Idee geht auf die Arbeiten von Stuart Samuel zurück [3] [4], welcher in seiner ursprünglichen Arbeit jedoch eine Tieftemperatur-Darstellung verwendete.

4.1. Hochtemperatur-Entwicklung

Zu Beginn soll ein expliziter Ausdruck für die Zustandssumme und die Spin-Spin-Korrelation des Ising-Modells abgeleitet werden. Dazu wird mit der Berechnung des Ausdrucks $\exp(\beta J \sigma_i \sigma_j)$ für $i \neq j$ begonnen.

$$\begin{aligned} \exp(\beta J \sigma_i \sigma_j) &= \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(\beta J)^{2k}}{(2k)!} (\sigma_i \sigma_j)^{2k} + \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(\beta J)^{2k+1}}{(2k+1)!} (\sigma_i \sigma_j)^{2k+1} \\ &= \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(\beta J)^{2k}}{(2k)!} + (\sigma_i \sigma_j) \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(\beta J)^{2k+1}}{(2k+1)!} \\ &= \cosh(\beta J) + (\sigma_i \sigma_j) \sinh(\beta J) \\ &= \cosh(\beta J) (1 + \tanh(\beta J) (\sigma_i \sigma_j)) \end{aligned} \quad (4.1)$$

Dabei wurde benutzt dass $(\sigma_i \sigma_j)^{2k} = 1$ und $(\sigma_i \sigma_j)^{2k+1} = (\sigma_i \sigma_j)$ gilt. Durch Einsetzen der Hamiltonfunktion (2.2) in die Definition der Zustandssumme (2.6) lässt sich für das Ising-Modell ein expliziter Ausdruck für Z finden. Die Summation erfolgt dabei über die Menge aller möglichen Spin-Konfigurationen $\{S\}$ des Gitters.

$$\begin{aligned}
Z(T, N, V) &= \sum_{\{S\}} \exp \left(\beta J \sum_{\langle i, j \rangle} \sigma_i \sigma_j \right) \\
&= \sum_{\{S\}} \prod_{\langle i, j \rangle} \exp(\beta J \sigma_i \sigma_j) \\
&= \cosh(\beta J)^{2N} \sum_{\{S\}} \prod_{\langle i, j \rangle} (1 + \tanh(\beta J) (\sigma_i \sigma_j)) \\
&= \cosh(\beta J)^{2N} \sum_{\{S\}} \prod_{\langle i, j \rangle} (1 + t (\sigma_i \sigma_j))
\end{aligned} \tag{4.2}$$

Bei dieser Ableitung wurde die Größe $t = \tanh(\beta J)$ eingeführt. Die Potenz $2N$ rührt von der Anzahl der Paare nächster Nachbarn auf dem Gitter her. Siehe dazu auch Abbildung 1.

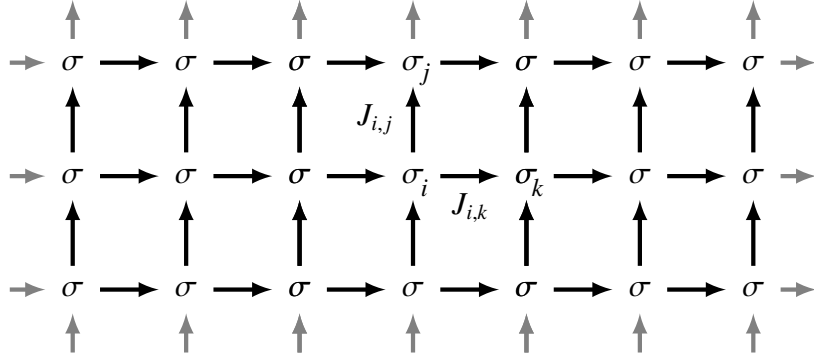


Abbildung 1: Darstellung der paarweisen Austauschwechselwirkungen $J_{i,j}$. Unter der Berücksichtigung periodischer Randbedingungen (hellgraue Pfeile) gibt es genau zwei Austauschintegrale pro Gitterpunkt.

Analog lässt sich ein expliziter Ausdruck für die Spin-Spin-Korrelation des Ising-Modells berechnen [1].

$$\begin{aligned}
\langle \sigma_p \sigma_q \rangle_{T,N,V} &= \frac{1}{Z} \sum_{\{S\}} \exp \left(\beta J \sum_{\langle i, j \rangle} \sigma_i \sigma_j \right) \sigma_p \sigma_q \\
&= \frac{1}{Z} \cosh(\beta J)^{2N} \sum_{\{S\}} \left(\prod_{\langle i, j \rangle} (1 + t (\sigma_i \sigma_j)) \right) \sigma_p \sigma_q
\end{aligned} \tag{4.3}$$

Die hier abgeleiteten Ausdrücke sind in (4.4) und (4.5) noch einmal zusammengefasst. Der Name “Hochtemperatur-Entwicklung” rührt daher, dass die Exponentialfunktion um $|\beta J \sigma_i \sigma_j| = \frac{J}{k_B T} \approx 0$ entwickelt wird. Da aber die Potenzreihe der Exponentialfunktion auf ganz \mathbb{R} analytisch ist, ist diese Darstellung der Zustandssumme tatsächlich auch für niedrigere Temperaturen exakt.

Zustandssumme und Spin-Spin-Korrelation für 2d Ising-Modell [1]

$$Z(T, N, V) = \cosh(\beta J)^{2N} \sum_{\{S\}} \prod_{(i,j)} (1 + t (\sigma_i \sigma_j)) \quad (4.4)$$

$$\langle \sigma_p \sigma_q \rangle_{T,N,V} = \frac{1}{Z} \cosh(\beta J)^{2N} \sum_{\{S\}} \left(\prod_{(i,j)} (1 + t (\sigma_i \sigma_j)) \right) \sigma_p \sigma_q \quad (4.5)$$

Die Summation läuft dabei über alle 2^N Spinkonfigurationen des Gitters

$$\{S\} = \{S = (\sigma_1, \sigma_2, \dots, \sigma_N) \mid \forall i : \sigma_i \in \{-1, 1\}\}$$

Dimensionloser Parameter t

$$t = \tanh\left(\frac{J}{k_B T}\right) \in [0, 1]$$

4.2. Korrelation als Zustandssumme auf defektem Gitter

Es soll nun eine Verbindung zwischen der Spin-Spin-Korrelation und der Zustandssumme des Ising-Modells hergestellt werden.

Man betrachte 2 Punkte x_p, x_q auf dem Gitter. Diese können immer durch eine Strecke auf dem Gitter verbunden werden. Diese Strecke ist nicht eindeutig und soll mit L_D bezeichnet werden. Weiteres soll $D = \{(i, j) \mid i, j \in L_D \wedge |i - j| = 1\}$ die Menge der Paare nächster Nachbarn in L_D sein. D soll als Gitterdefekt bezeichnet werden. Unter Verwendung der Eigenschaft $\sigma_i^2 = 1$ erhält man

$$\sigma_p \sigma_q = \prod_{x_i \in L_D} \sigma_i^2 \sigma_p \sigma_q = \prod_{(i,j) \in D} \sigma_i \sigma_j \quad (4.6)$$

Mithilfe dieser Relation kann nun die Summe in (4.5) umgeschrieben werden.

$$\begin{aligned} \sum_{\{S\}} \left(\prod_{(i,j)} (1 + t (\sigma_i \sigma_j)) \right) \sigma_p \sigma_q &= \sum_{\{S\}} \left(\prod_{(i,j) \notin D} ((1 + t (\sigma_i \sigma_j))) \right) \left(\prod_{(i,j) \in D} \sigma_i \sigma_j \right) \\ &= \sum_{\{S\}} \left(\prod_{(i,j) \notin D} ((1 + t (\sigma_i \sigma_j))) \right) \left(\prod_{(i,j) \in D} ((1 + t (\sigma_i \sigma_j)) \sigma_i \sigma_j) \right) \\ &= \sum_{\{S\}} \left(\prod_{(i,j) \notin D} ((1 + t (\sigma_i \sigma_j))) \right) \left(\prod_{(i,j) \in D} (((\sigma_i \sigma_j) + t)) \right) \\ &= t^m \sum_{\{S\}} \left(\prod_{(i,j) \notin D} ((1 + t (\sigma_i \sigma_j))) \right) \left(\prod_{(i,j) \in D} (((1 + \frac{1}{t} \sigma_i \sigma_j))) \right) \\ &= t^m \sum_{\{S\}} \left(\prod_{(i,j)} (1 + t_{i,j} (\sigma_i \sigma_j)) \right) \end{aligned} \quad (4.7)$$

Hierbei ist $m = \#D$ die Anzahl der Paare in D . Bis auf den Vorfaktor t^m lässt sich in (4.7) die Summe als Zustandssumme des Ising-Modells mit modifiziertem ortsabhängigem t identifizieren.

Spin Korrelation als Zustandssumme auf defektem Gitter

$$\langle \sigma_p \sigma_q \rangle_{T,N,V} = \frac{t^m Z_D}{Z} \quad (4.8)$$

$$Z_D = \cosh(\beta J)^{2N} \sum_{\{S\}} \prod_{(i,j)} (1 + t_{i,j} (\sigma_i \sigma_j)) \quad (4.9)$$

$$t_{i,j} = \begin{cases} t^{-1} & \text{für } (i, j) \in D \\ t & \text{sonst} \end{cases}$$

4.3. Graphische Repräsentation der Zustandssumme

Aufgrund von (4.9) muss zur Reformulierung des Ising-Modells ein Ausdruck für die Zustandssumme mit beliebigen $t_{i,j}$ gefunden werden. Bei der Auswertung des Produkts in (4.9) erhält man eine Summe, bei der die Summanden aus der Entscheidung für 1 oder $t_{i,j} \sigma_i \sigma_j$ in jedem Multiplikanten herrührt. Es handelt sich also um eine Summation über alle Produkte von Spin-Paaren unterschiedlicher Länge $n \in \{0, 1, \dots, 2N\}$.

$$\begin{aligned} \sum_{\{S\}} \prod_{(i,j)} (1 + t_{i,j} (\sigma_i \sigma_j)) &= \sum_{\{S\}} 1 + \sum_{(i,j)} t_{i,j} (\sigma_i \sigma_j) + \sum_{(i,j)} \sum_{(k,l)} t_{i,j} t_{k,l} (\sigma_i \sigma_j) (\sigma_k \sigma_l) \dots \\ &= \sum_{\{S\}} \sum_{\{(i_1, j_1), \dots, (i_n, j_n)\}} t_{i_1, j_1} \dots t_{i_n, j_n} (\sigma_{i_1} \sigma_{j_1}) (\sigma_{i_2} \sigma_{i_2}) \dots (\sigma_{i_n} \sigma_{j_n}) \end{aligned}$$

Aufgrund der Summation über alle Spinkonfigurationen S tragen alle Produkte, in denen zumindest eine Spinvariable σ_k in ungerader Anzahl vorkommt, nicht zum Gesamtergebnisse bei. Denn für jede Konfiguration $S = (\sigma_1, \dots, \sigma_k, \dots, \sigma_{2N})$ gibt es genau eine weitere Konfiguration $S' = (\sigma_1, \dots, -\sigma_k, \dots, \sigma_{2N})$, sodass sich diese dann aufheben. Eine Produkt von Isingsspin Paaren, in dem jede Spinvariable in gerader Anzahl vorkommt, hat hingegen immer den Wert 1, unabhängig von der Spinkonfiguration S . Durch die Summation über die Spinkonfigurationen entsteht dann ein Vorfaktor 2^N für diese Terme.

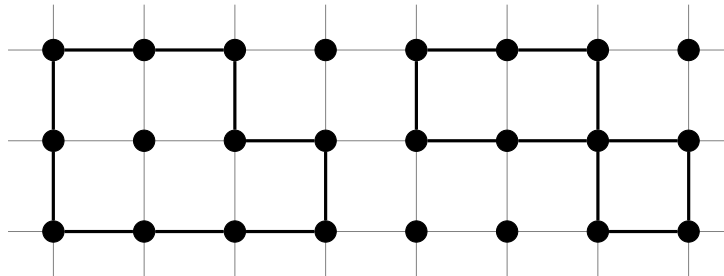


Abbildung 2: Ein möglicher Graph auf dem Gitter mit einer Selbstüberschneidung

Identifiziert man jedes Spin-Paar als Verbindungslinie zwischen den zugehörigen Gitterpunkten, so repräsentiert jedes Spin-Paar-Produkt genau einen Graphen G auf dem Gitter. Die Kanten K_G des Graphen entsprechen dann genau den Spin-Paare. Die zugehörigen Gitterpunkte sind die Vertices V_G des Graphen. Da nur die Produkte beitragen, in denen jede Spin-Variablen in gerader Anzahl vorkommt, schließen an jeden Vertex 0, 2 oder 4 Kanten an. Daher muss ein solcher Graph geschlossen sein. Zudem durchläuft man, wenn man sich in dem Spin-Paar-Produkt von Gitterpunkt zu Gitterpunkt hangelt, jede Kante nur genau einmal, da jedes Spin-Paar nur einmal im Produkt vorkommt. Dabei ist zu beachten, dass ein Graph aus mehreren getrennten sich selbst überschneidenden Schleifen bestehen darf, wie zum Beispiel in Abbildung 2 gezeigt ist. Zudem dürfen die Graphen auch über den periodischen Rand schließen. Da das Produkt in (4.9) über alle Paare nächster Nachbarn und damit Spin-Paare geht, werden alle möglichen Graphen, mit diesen Eigenschaften erzeugt. Man kann die Zustandssumme Z_D dann, wie in (4.10) also als Summe über alle geeigneten Graphen schreiben. Das Gewicht eines Graphen wird durch das Produkt der zu den Kanten gehörigen $t_{i,j}$ bestimmt.

Graphische Representation der Summe Z_D

$$Z_D = 2^N \cosh(\beta J)^{2N} \sum_{\{G\}} \prod_{(i,j) \in K_G} t_{i,j} \quad (4.10)$$

Die Graphen $G = (V_G, K_G)$ besitzen die Eigenschaften:

- i) Alle Vertices des Graphen liegen auf dem Gitter
- ii) G ist geschlossen (auch über periodischen Rand)
- iii) G kann durchlaufen werden ohne eine Kante zweimal zu nutzen.

Für den Fall des nicht defekten Gitters wird das Gewicht der Graphen allein durch die Anzahl $N_K(G)$ der Kanten bestimmt.

$$\sum_{\{S\}} \prod_{(i,j)} (1 + t (\sigma_i \sigma_j)) = 2^N \sum_{\{G\}} t^{N_K(G)} \quad (4.11)$$

4.4. Graphen ausgedrückt durch Graßmann-Variablen

Im Folgenden bezeichne Λ das Ising-Gitter mit N Gitterpunkten. Für jeden Gitterpunkt x_i werden vier Graßmann-Variablen $h_{x_i}^o, h_{x_i}^x, v_{x_i}^o, v_{x_i}^x$ eingeführt.

$$\begin{array}{c} v_i^x \\ \times \\ h_i^o \circ i \times h_i^x \\ \circ \\ v_i^o \end{array}$$

Abbildung 3: Graßmann-Variablen assoziiert mit Gitterpunkt $x_i \in \Lambda$

Neben der Position am Gitter besitzt jede Variable eine Orientierung, gekennzeichnet mit h für “Horizontal” und v für “Vertikal” und eine Fluss-Richtung, gekennzeichnet durch o für “hinein” und x für “hinaus”. Variablen wie h_i^x und h_i^o mit gleicher Orientierung und unterschiedlicher Fluss-Richtung werden als zueinander konjugiert bezeichnet. Die Reihenfolge der Generatoren der so erzeugten Graßmann-Algebra wird in dem Graßmann-Vektor (4.12) beziehungsweise in dem “Integrationsmaß” (4.13) festgehalten.

$$\eta = (h_{x_1}^o, h_{x_1}^x, v_{x_1}^o, v_{x_1}^x, \dots, h_{x_N}^o, h_{x_N}^x, v_{x_N}^o, v_{x_N}^x) \quad (4.12)$$

$$D_{h,v} = \prod_{x_i \in \Lambda} dh_{x_i}^x dh_{x_i}^o dv_{x_i}^x dv_{x_i}^o \quad (4.13)$$

Die Nummerierung der Gitterpunkte ist dabei grundsätzlich egal, da Paare von Graßmann-Variablen miteinander kommutieren. Um später aber die darstellenden Matrix bezüglich dem in (4.12) angegeben Vektor jedoch möglichst einfach zu gestalten, soll die Nummerierung der Gitterpunkt nun wie in Abb. 4 festgelegt werden. Diese Nummerierung besitzt die Eigenschaft, dass ein Verschiebung der Indizierung um $2M(M+1)$ durch eine Punktspiegelung erreicht wird.

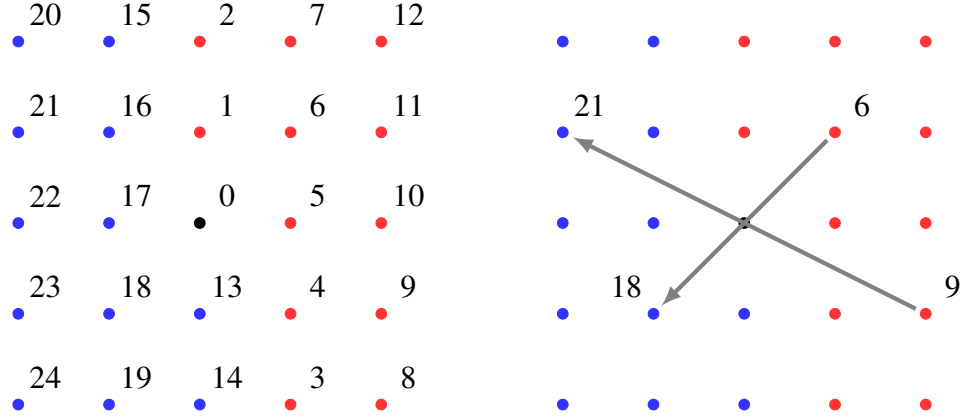


Abbildung 4: Nummerierung eines Gitters für $M = 2$ und Veranschaulichung der Punktspiegelung

Die Idee ist es nun die Zustandssumme Z als Berezin-Integral einer geeigneten Graßmann-Funktion zu schreiben. Dazu wird eine quadratische Wirkung A gemäß (4.14) eingeführt.

$$\begin{aligned} A(\eta) &= A_{bond}(\eta) + A_{corner}(\eta) + A_{monomer}(\eta) \\ A_{bond}(\eta) &= \sum_{x_i \in \Lambda} \alpha_g h_{x_i}^x h_{x_i+e_x}^o + \alpha_h v_{x_i}^x v_{x_i+e_y}^o \\ A_{corner}(\eta) &= \sum_{x_i \in \Lambda} \alpha_a h_{x_i}^x v_{x_i}^o + \alpha_b v_{x_i}^x h_{x_i}^o + \alpha_c v_{x_i}^o h_{x_i}^o + \alpha_d v_{x_i}^x h_{x_i}^x \\ A_{monomer}(\eta) &= \sum_{x_i \in \Lambda} \alpha_e h_{x_i}^o h_{x_i}^x + \alpha_f v_{x_i}^o v_{x_i}^x \end{aligned} \quad (4.14)$$

Um die Zustandssumme mithilfe der Graßmann-Wirkung auszudrücken müssen nun die Koeffizienten C und α_a bis α_f so bestimmt werden, dass (4.15) erfüllt ist.

$$\sum_{\{G\}} t^{N_K(G)} \stackrel{!}{=} C \int D_{h,v} e^A \quad (4.15)$$

Dazu wird jedem Paar von Graßmann-Variablen eine graphische Interpretation zugeordnet. Diese sind in Abb. 5 gezeigt. Die Richtungen der Pfeile repräsentieren dabei die Reihenfolge der Variablen in den Paaren. Ein Vertauschen der Variablen resultiert, graphisch interpretiert, somit in einer Richtungsumkehrung des Pfeils. Im folgenden sollen diese acht Paare immer als $P_{i,\mu}$ abgekürzt werden, wobei μ der Buchstabe aus Abb. 5 bzw. der Index des zugehörigen Koeffizienten α_μ ist.

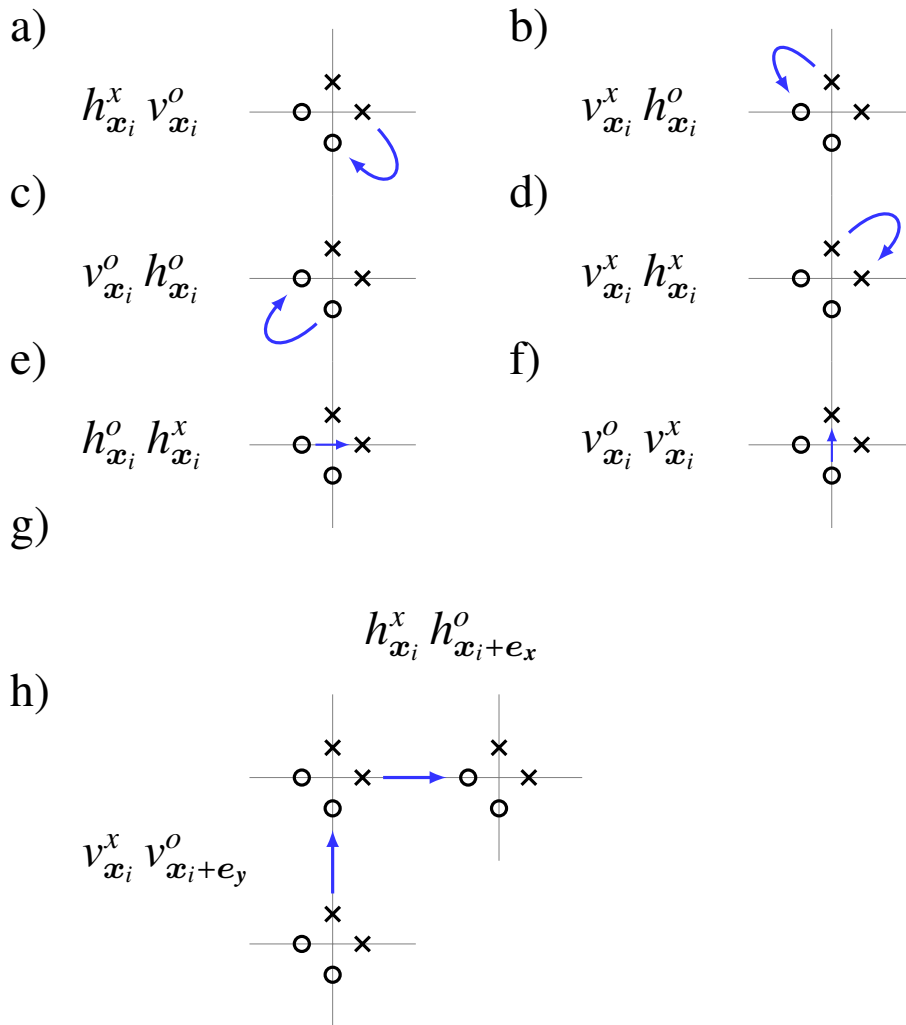


Abbildung 5: Graphische Darstellung der Paare von Graßmann-Variablen in (4.14)

Im folgenden sollen ungerichtete Graphen, wie sie in der Summe (4.10) auftauchen untersucht werden. Jeder geeignete Graph lässt sich allein durch die graphischen Elemente 5g) und 5h)

eindeutig festlegen. Somit repräsentiert ein Produkt der Paare $P_{i,g}$ und $P_{i,h}$ einen Graphen auf dem Gitter. Die Richtung der Pfeile gibt dabei jedoch nicht die Durchlaufrichtung des Graphen an, sondern die Reihenfolge der Variablen in den assoziierten Paaren.

Wird jedoch die Spur eines solchen Produktes gebildet, so verschwindet das Berezin-Integral, da höchstens zwei von vier Graßmann-Variablen pro Gitterpunkt auftauchen können. Die anderen Paare aus Abb. 5 werden somit hinzugefügt, sodass jede Variable einmal vorkommt und das Integral nicht verschwindet.

Ein Graph, der mit einem Produkt von $2N$ Paaren assoziiert wird, welches nicht unter der Spurbildung verschwindet, hat dabei die folgenden Eigenschaften:

- i) Der zugehörige Graph ist geschlossen. Denn wäre dies nicht so, so gäbe es einen Vertex an dem eine ungerade Anzahl an Kanten anschließt. Dies bedeutet aber, dass für den zugehörigen Gitterpunkt maximal 3 zugehörige Variablen im Produkt auftreten. Daher verschwindet die Spur dieses Produktes.
- ii) Der zugehörige Graph kann durchlaufen werden, ohne eine Kante zweimal zu nutzen. Denn das Durchlaufen des Graphen wird abgehandelt, indem man sich über Paare vom Typ h) oder g) von Gitterpunkt zu Gitterpunkt hangelt. Würde man dabei eine Kante zweimal nutzen, so käme eine Variable im Produkt doppelt vor. Das Produkt würde also verschwinden.

Unter der Spurbildung nicht verschwindende Produkte von $2N$ Paaren $P_{i,\mu}$ repräsentieren somit genau die gewünschten Graphen auf dem Gitter. Gitterpunkte, die nicht Teil eines Graphen sind, sollen in Anlehnung an die Arbeit von Stuart Samuel als "Monomer" bezeichnet werden und können durch die Produkte $P_a P_b$, $P_c P_d$, $P_e P_f$ dargestellt werden.

Betrachtet man die Definition der Exponentialfunktion genauer, so erkennt man, dass e^A eine Summe aller Produkte von Paaren $P_{i,a}$ bis $P_{i,h}$ beliebiger Paar-Anzahl und Reihenfolge darstellt.

$$\begin{aligned}
 e^A &= \exp \left(\sum_{i \in \Lambda} \sum_{\mu \in \{a, \dots, h\}} a_\mu P_{i,\mu} \right) \\
 &= \sum_{k \in \mathbb{N} \setminus \{2N\}} \frac{1}{k!} \left(\sum_{i \in \Lambda} \sum_{\mu \in \{a, \dots, h\}} a_\mu P_{i,\mu} \right)^k + \frac{1}{(2N)!} \left(\sum_{i \in \Lambda} \sum_{\mu \in \{a, \dots, h\}} a_\mu P_{i,\mu} \right)^{2N}
 \end{aligned} \tag{4.16}$$

Die Spurbildung liefert nur für Produkte von exakt $2N$ Paaren einen von Null verschiedenen Wert. Die linke Doppelsumme verschwindet somit unter der Integration. Die rechte Summe besteht aus allen Produkten aus $2N$ Paaren die auf dem Gitter möglich sind. Von diesen liefern nur jenen einen von null verschiedenen Beitrag, welche einen der gewünschten Graphen aus (4.10) auf dem Gitter repräsentieren.

Um den Beitrag eines nicht verschwindenden Produktes unter der Spurbildung zu berechnen, müssen die Graßmann-Variablen in die richtige Reihenfolge gebracht werden. Der Beitrag eines Produktes ergibt sich dann als das Produkt der Koeffizienten α_μ mal dem, durch die Umordnung entstandenen, Vorzeichen. Jeder Graph G soll nun mit $t^{N_E(G)}$ gewichtet werden. Daher müssen $\alpha_g = \alpha_h = t$ gewählt werden. Für die übrigen Koeffizienten bleibt nur mehr die Wahl ± 1 .

Nun wird ein Graph durch mehrere Produkte von Graßmann-Variablen dargestellt. Da Paare von Graßmann-Variablen kommutieren, ist zum Beispiel jede Permutation eines Produktes eine äquivalente Darstellung eines Graphen. Diese, durch Permutation entstehende Multiplizität, wird durch den Faktor $((2N)!)^{-1}$ kompensiert. Weitere Multiplizitäten entstehen durch die unterschiedlichen Darstellungen der “Monomer”. Die übrigen Koeffizienten müssen nun so gewählt werden dass jeder Graph, trotz mehrfacher Darstellung mit dem gleichen Vorzeichen und dem korrekten Gewicht in die Summe eingeht.

4.4.1. Beitrag der Monomer-Paare

Für die Gitterpunkte die zu keinem Graphen gehören gibt es drei mögliche Darstellungen. Somit kann der selbe Graph 3^{N_M} in der Summe (4.16) auftauchen, wobei N_M die Anzahl der “Monomer” des Graphen ist. Der Beitrag eines Graphen zur Summe ergibt sich dann als Summe der einzelnen Darstellungen. Um den Beitrag eines einzelnen “Monomer” zu bestimmen, müssen zunächst die Vorzeichen der einzelnen Darstellungen berechnet werden. Die “Monomer”-Paare $P_{i,e}$ und $P_{i,f}$ sind bereits richtig angeordnet.

$$\iint dh_i^x dh_i^o P_{i,e} = \iint dh_i^x dh_i^o h_i^x h_i^o = 1 \quad (4.17)$$

$$\iint dv_i^x dv_i^o P_{i,f} = \iint dv_i^x dv_i^o v_i^x v_i^o = 1 \quad (4.18)$$

Daher ergibt sich

$$-\underbrace{h_i^x v_i^o v_i^x h_i^o}_{=P_{i,a}P_{i,b}} = h_i^x v_i^o h_i^o v_i^x = \underbrace{h_i^o h_i^x v_i^o v_i^x}_{=P_{i,e}P_{i,f}} = -h_i^o v_i^o h_i^x v_i^x = -\underbrace{v_i^o h_i^o v_i^x h_i^x}_{=P_{i,c}P_{i,d}} \quad (4.19)$$

für die 3 Darstellungen der “Monomer”. Somit trägt jeder Gitterpunkt, der nicht Teil eines Graphen ist, mit einem Faktor

$$\alpha_e \alpha_f - \alpha_a \alpha_b - \alpha_c \alpha_d$$

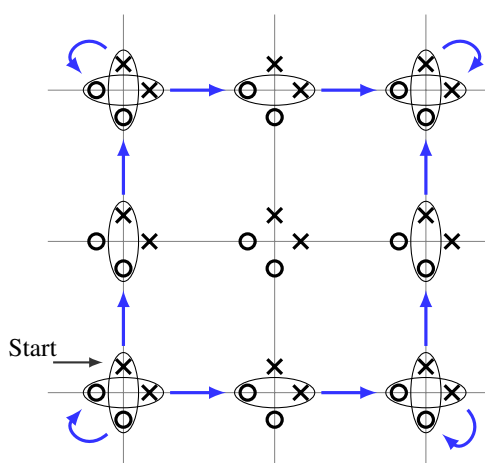
zum Gesamtgewicht eines Graphen bei. Mit der Wahl $\alpha_e = \alpha_f$, $\alpha_a = \alpha_b$ und $\alpha_c = \alpha_d$ beläuft sich der Beitrag schließlich für jeden Monomer auf -1 und beeinflusst daher nur das Vorzeichen mit dem der Graph eingeht. Nun ist der Absolutwert der Gewichtung jedes Graphen eindeutig bestimmt und es bleibt nur noch die übrigen 3 Freiheitsgrade so zu wählen, dass jeder Graph mit dem gleichen Vorzeichen eingeht.

4.4.2. Vorzeichen eines zusammenhängenden inneren Graphen ohne Selbstüberschneidung

Als innerer Graph wird im folgenden ein geschlossener Graph bezeichnet, der nicht über den periodischen Rand des Gitters schließt. Zusammenhängend heißt hierbei dass der Graph nicht aus zwei räumlich getrennten Schleifen wie in Abb. 2 bestehen darf. Um das Vorzeichen geschlossener innerer Graphen auswerten zu können, muss man die Graßmann-Variablen derart umordnen, sodass die Integration am Ende 1 ergibt. Das Vorzeichen ergibt sich aus den notwendigen Vertauschungen. Hierzu soll ein graphisches Vorgehen die Rechnung ersetzen. Die

einzelnen Monomer-Paare sind jeweils schon richtig behandelt und können weggelassen werden. Zur Bestimmung des Vorzeichens eines geschlossenen Graphen geht man dann in den folgenden Schritten vor:

- 0) Man wählt ein Paar vom Typ g oder h als das Erste. Graphisch betrachtet, wählt man so auf dem Graphen einen Seite eines Gitterknotens mit einem x als Startpunkt und geht in Richtung des Pfeils zum nächsten Gitterknoten. Diese Richtung legt die Durchlaufrichtung des Graphen fest.
- 1) Man wählt ein Paar als Nachfolger, welches eine, zur zweiten Variable des Vorgängerpaars konjugierte Variable enthält. Damit ist das Nachfolgerpaar eindeutig festgelegt. Anschließend werden die beiden Variablen im Nachfolgerpaar vertauscht, falls die konjugierte Variable nicht die erste Variable ist. Nun kann ein weiterer Nachfolger bestimmt werden. Graphisch erfolgt ein Vorzeichenwechsel für jeden Pfeil im Graphen, der entgegen der Durchlaufrichtung liegt. Der Algorithmus wird fortgesetzt bis das nächste Paar, das erste wäre. Ist dies nie der Fall, ist der Graph nicht geschlossen und somit nicht relevant.
- 2) Nun wird die letzte Variable an den Anfang gehängt und die Paare umgeklammert. Da die erste Variable eine mit x Fluss-Richtung ist, muss im nächsten Schritt eine zusätzliche Vertauschung vorgenommen werden und es ergibt sich ein zusätzlicher Faktor -1 . Dieses Vorzeichen geht auf die Schließung des Graphen zurück.
- 3) Durch Umklammern erhält man lauter Paare konjugierter Variablen. Wenn in jedem Paar o vor x kommt, ist das Integral positiv. Somit müssen Paare, wo dies nicht gilt, vertauscht werden. Graphisch fasst man dafür bei jedem Knoten die Variablen gleicher Orientierung zusammen, wie im Abb. 6 mit roten Ellipsen gekennzeichnet. Kommt hier in Durchlaufrichtung ein x vor einem o führt dies zu einem Vorzeichenwechsel.



Um das Vorzeichen des Graphen zu bestimmen wählt man einen Startpunkt, hier ein x . Dann bewegt man sich in die Richtung des ersten Pfeiles vom Startpunkt weg durch den Graphen. Dabei bewegt man sich bei den Ellipsen immer entlang der längeren Achse. Für jeden Pfeil der entgegen der Bewegungsrichtung zeigt, sowie immer wenn in einer Ellipse x vor o kommt, erhält man einen Vorzeichenwechsel. Hier erhält man 7 Vorzeichenwechsel für die Pfeilrichtung, 6 Vorzeichenwechsel für die xo Paare und einen zusätzlich für die Schließung des Graphen. Insgesamt also $(-1)^{7+6+1} = +1$ als Vorzeichen.

Abbildung 6: Vorzeichenbestimmung geschlossener zusammenhängender Graphen

Mithilfe dieser graphischen Regel kann nun leicht das Vorzeichen eines beliebigen geschlossenen Graphen bestimmt werden. Die Regel ermöglicht jedoch auch eine Segmentierung eines Graphen, in unterschiedliche Bausteine wie in Abb. 8. Aus der in Abb. 7 gezeigten Segmentierung in entgegengesetzte Richtungen lassen sich 12 Bausteine ermitteln, mit denen jeder geschlossene Graph ohne Selbstüberschneidung gebaut werden kann. Die Vorzeichen dieser Bausteine sind in Abb. 8 angegeben. Für *b*) ergibt sich zum Beispiel ein Vorzeichenwechsel für das zweite *xo* Paar und den zweiten Pfeil der gegen die Durchlaufrichtung zeigt. Insgesamt also ein positives Vorzeichen. Das Vorzeichen eines geschlossenen Graphen ohne Selbstüberschneidung ergibt sich dann als Produkt der Vorzeichen der Segmente und dem Vorzeichen für die Schließung des Graphen. Für den geschlossenen Graphen in Abb. 6 ergibt sich insgesamt ein positives Vorzeichen. Durch Hinzufügen von Elementen *a*) bis \bar{h}) lässt sich jeder beliebige geschlossene, zusammenhängende Graph ohne Selbstüberschneidung erstellen. Dabei kommen die Elemente *a*) bis *d*) immer paarweise mit ihrer komplementären Sequenz \bar{a}) bis \bar{d}) vor. Somit ändert sich das Vorzeichen nicht und alle geschlossenen zusammenhängenden inneren Graphen ohne Selbstüberschneidung haben positives Vorzeichen.

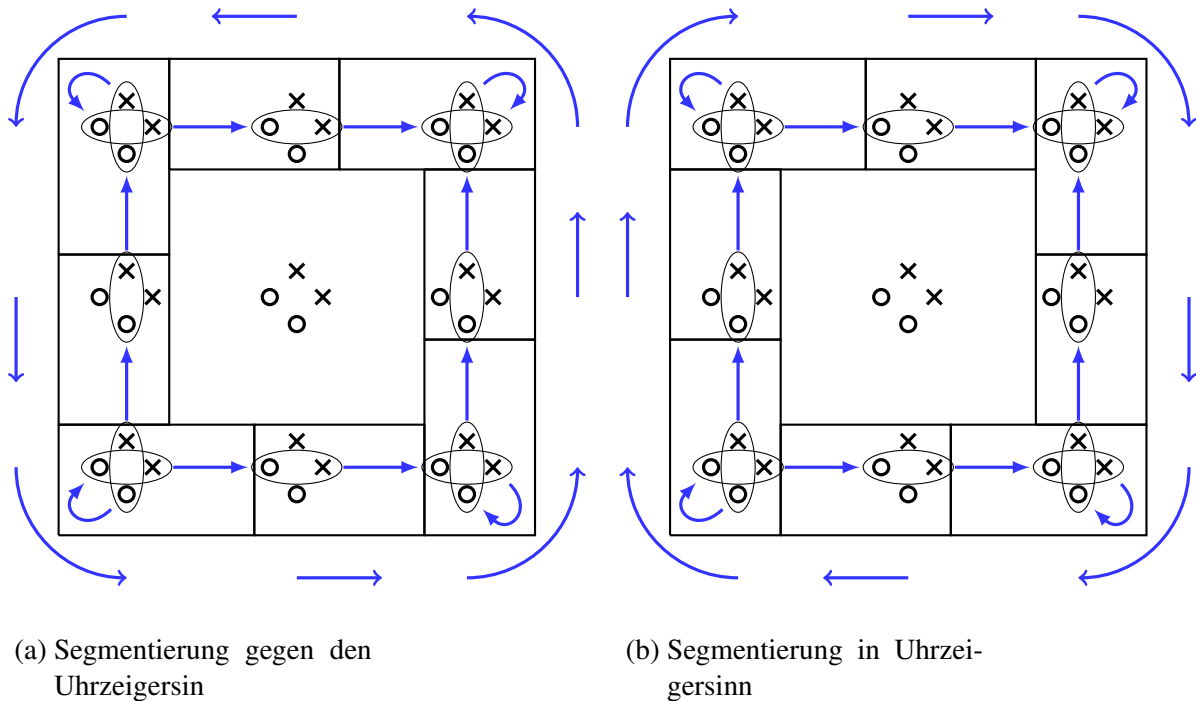


Abbildung 7: Segmentierung des Graphen aus Abb. 6

4.4.3. Vorzeichen von Überschneidungen innerer Graphen

Das Vorzeichen eines geschlossenen, zusammenhängenden inneren Graphen mit einer Selbstüberschneidung kann mit der selben Methode bestimmt werden, wie für geschlossene innere Graphen ohne Selbstüberschneidung. Das Vorzeichen ergibt sich dann als Produkt des Vorzeichens V_c für die Schließung, des Vorzeichens V_k für die Kreuzung und des Vorzeichens V_s

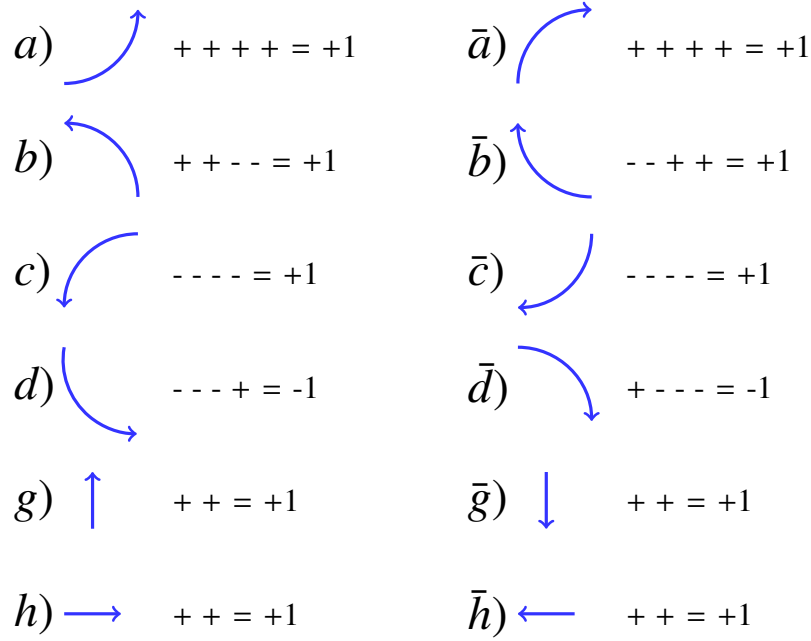


Abbildung 8: Alle Teilsequenzen eines beliebigen gerichteten Graphen

aufgrund der vorkommenden Segmente $a)$ bis $\bar{h})$. Die Kreuzung kann durch keines der Segmente $a)$ bis $\bar{h})$ dargestellt werden. Der Algorithmus zur Bestimmung des Vorzeichens durch Umordnen legt aber eindeutig fest, wie die Kreuzung durchlaufen wird. Dadurch kann der Graph in zwei Schleifen mit entgegengesetzter Durchlaufrichtung aufgeteilt werden. Ersetzt man die Kreuzung durch zwei Elemente x und \bar{x} , wobei x eines der Segmente $a)$, $b)$, $c)$ und $d)$ ist, erhält man zwei geschlossenen Graphen mit positiven Vorzeichen, welches sich als Produkt $V_{1,s} \cdot V_{1,c}$ bzw. $V_{2,s} \cdot V_{2,c}$ schreiben lässt. Damit die Ersetzung der Kreuzung durch der Segmentpaare $x - \bar{x}$ eine gültige Darstellung als Produkt von Graßman Paaren hat, müssen die getrennten Graphen auf dem Gitter auseinander geschoben werden und die Terme $P_a P_b$ oder $P_c P_d$ hinzugefügt werden. Die Translation am Gitter ändert das Vorzeichen nicht, die zusätzlichen Paare führen jedoch zu einem negativen Vorzeichen. Das Austauschen der Kreuzung trägt also mit einem negativen Vorzeichen bei. Dies erkennt man auch aus der folgenden Rechnung.

$$V_c \cdot V_k \cdot V_s = V_c \cdot V_k \cdot V_{1,s} \cdot V_{2,s} \stackrel{!}{=} V_{1,c} \cdot V_{1,s} \cdot V_{2,c} \cdot V_{2,s} \quad (4.20)$$

$$V_c = V_{1,c} = V_{2,c} = -1 \quad \Rightarrow \quad V_k = -1$$

Die Argumentation lässt sich nun leicht auf Graphen mit N_k Selbstüberschneidungen ausweiten, indem man diese induktiv, wie oben, in Graphen ohne Selbstüberschneidung zerlegt. Dabei liefert jede Kreuzung ein negatives Vorzeichen.

4.4.4. Wahl der übrigen Koeffizienten

Die übrigen Koeffizienten werden zu -1 gewählt. Damit tragen alle Gitterpunkte die keine “Monomer” oder Kreuzungen sind mit einem Faktor -1 zum Gesamtgewicht bei. Da jede Kreuzung in einem Graphen und jeder “Monomer” ebenfalls mit -1 zum Vorzeichen des Gesamtgewicht beiträgt, gehen nun alle Graphen mit einem Vorzeichen von $(-1)^N$ ein. Damit ergibt sich die Graßmann-Wirkung wie in (4.21).

Graßmann-Wirkung zur Reformulierung des Ising-Modells

$$\begin{aligned}
 A(\eta) &= A_{\text{bond}}(\eta) + A_{\text{corner}}(\eta) + A_{\text{monomer}}(\eta) \\
 A_{\text{bond}}(\eta) &= \sum_{x_i \in \Lambda} t h_{x_i}^x h_{x_i+e_x}^o + t v_{x_i}^x v_{x_i+e_y}^o \\
 A_{\text{corner}}(\eta) &= - \sum_{x_i \in \Lambda} h_{x_i}^x v_{x_i}^o + v_{x_i}^x h_{x_i}^o + v_{x_i}^o h_{x_i}^o + v_{x_i}^x h_{x_i}^x \\
 A_{\text{monomer}}(\eta) &= - \sum_{x_i \in \Lambda} h_{x_i}^o h_{x_i}^x + v_{x_i}^o v_{x_i}^x
 \end{aligned} \tag{4.21}$$

Damit die Zustandssumme positiv ist, muss diese letzten Endes noch mit einem Vorfaktor $C = (-1)^N$ multipliziert werden. Abschließend sei angemerkt, dass die Diskussion für das Vorzeichen eines geschlossenen Graphen nur für jene gilt, die nicht über den periodischen Rand schließen (innere Graphen) oder durch eine Translation auf einen solchen Graphen abgebildet werden können. Für die übrigen Graphen, welche als äußere Graphen bezeichnet werden sollen, gilt die Diskussion nicht, da das Vorzeichen für die Schließung nicht auftritt. Das Vorzeichen eines äußeren Graphen ist somit $(-1)^{(N-1)}$ und verfälscht daher die Gesamtsumme. Da ein äußerer Graph aber zumindest \sqrt{N} Kanten haben muss, verschwindet der Beitrag eines solchen Graphen im Thermodynamischen Limes, da $t < 1$ gilt. Diese Terme führen tatsächlich noch in einem gewissen Temperaturbereich zu Problemen mit dem Vorzeichen, wenn es zur Berechnung der Zustandssumme kommt, wie in Appendix A genauer geschildert wird. Dieses Phänomen kann jedoch bei der Berechnung der Magnetisierung, aufgrund der Darstellung als Quotient zweier Zustandssummen, vernachlässigt werden können.

Mithilfe der in (4.21) definierte Wirkung A lässt sich somit eine Graßmann-Dichte e^A definieren, deren Spur gemäß (4.22) mit der Zustandssumme in Verbindung steht. Die Gleichheit gilt jedoch nur asymptotisch im Thermodynamischen Limes, was durch “ \approx ” angedeutet wird.

Zustandssumme als Spur einer Graßmann-Funktion

$$\sum_{\{G\}} t^{N_K(G)} \approx (-1)^N \int D_{h,v} e^A \tag{4.22}$$

Die Wirkung A in (4.21) beschreibt zunächst nur das nicht defekte homogene Gitter. Da aber die Koeffizienten der Paare $P_{i,g}$ und $P_{i,h}$ die Gewichtung der Gitterverbindungen bestimmen,

müssen nur diese abgeändert werden um das defekte Gitter beschreiben zu können. Um eine Kantengewichtung auf $t_{i,j}$ zu ändern, muss daher nur das entsprechende Graßmann-Paar mit einem Vorfaktor $(t_{i,j} - t)$ zur Wirkung addiert werden. Dies wurde z.B. in (5.3) benutzt.

4.5. Fouriertransformation der Graßmann-Wirkung

Die darstellende Matrix A der Graßmann-Wirkung A ist stark besetzt. Dies macht es schwierig diese aufzustellen beziehungsweise die Pfaffsche Determinante zu berechnen. Da periodische Randbedingungen angenommen wurden, ist zu erwarten, dass eine diskrete Fouriertransformation der darstellenden Matrix A in einer Art Block-Diagonalmatrix \hat{A} resultiert und das Problem erheblich erleichtert.

Um diese Transformation durchzuführen, werden alle Variablen mit gleicher Orientierung und gleicher Fluss-Richtung zu einer Familie von Variablen, gekennzeichnet durch den Index $v \in \{(h, x), (h, o), (v, x), (v, o)\}$, zusammengefasst. Somit bezeichnet zum Beispiel $(\eta_i^{(v,x)})_{i \in \Lambda} = (v_i^x)_{i \in \Lambda}$ die Familie aller vertikal ausgerichteten Graßmann-Variablen mit Fluss-Richtung x auf dem Gitter Λ . Es gibt dann insgesamt vier solcher Familien. Die diskrete Fouriertransformation wird nun für jede Familie von Graßmann-Variablen getrennt durchgeführt. Dabei bezeichnet $x = (x_1, x_2)$ die expliziten Koordinaten auf dem Gitter und $k = (k_1, k_2)$ die Koordinaten im reziproken Raum, welche innerhalb der ersten Brillouin-Zone $\bar{\Lambda}$ liegen.

$$\bar{\Lambda} = \left\{ \frac{2\pi}{2M+1}(q_1, q_2) \mid q_1, q_2 \in \{-M, \dots, M\} \right\} \quad (4.23)$$

Die Transformationsvorschrift ist in (4.24) und (4.25) angegeben. Da es sich bei der Fouriertransformation um eine unitäre, und damit invertierbare lineare Transformation handelt, bilden die fouriertransformierten Variablen einen äquivalenten Satz von Graßmann-Variablen.

$$\eta_x^v = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{k \in \bar{\Lambda}} \hat{\eta}_k^v e^{-ik \cdot x} \quad (4.24)$$

$$\hat{\eta}_k^v = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{x \in \Lambda} \eta_x^v e^{ik \cdot x} \quad (4.25)$$

Bezeichnet $\hat{\eta}^v$ den Vektor der fouriertransformierten Variablen einer Familie so kann diese Transformation auch mithilfe einer Matrix W geschrieben werden.

$$\hat{\eta}^v = W \eta^v \quad (4.26)$$

$$\eta^v = W^\dagger \hat{\eta}^v \quad (4.27)$$

Die Nummerierung der Gitterpunkte im K-Raum ist letztlich ebenfalls maßgeblich für die Form der darstellenden Matrizen der Fouriertransformation und der transformierten Wirkung \hat{A} . Da das Gitter quadratisch ist, ist auch das reziproke Gitter quadratisch. Die Nummerierung der Punkte innerhalb der Brillouin-Zone soll daher genau wie auf dem ursprünglichen Gitter erfolgen.

Als nächstes soll der Vorfaktor berechnet werden, der durch diese lineare Transformation entsteht. Das Integrationsmaß für die fouriertransformierten Graßmann-Variablen ist in (4.28) angegeben.

$$\hat{D}_{h,v} = \prod_{i=1}^N d\hat{h}_i^x d\hat{h}_i^o d\hat{v}_i^x d\hat{v}_i^o \quad (4.28)$$

Um den Vorfaktor für diese Transformation zu bestimmen, muss beachtet werden, dass jede Familie separat transformiert wird. Die Reihenfolge der Variablen der Algebra muss dazu umgeordnet werden. Es sei \mathbf{P} die darstellende Matrix der Permutation, welche dieser Umordnung entspricht. Dann ergibt sich für die Fouriertransformation die folgende Vorschrift.

$$\boldsymbol{\eta} = \mathbf{P}^{-1} \begin{pmatrix} \mathbf{W}^\dagger & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \mathbf{W}^\dagger & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \mathbf{W}^\dagger & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \mathbf{W}^\dagger \end{pmatrix} \mathbf{P} \hat{\boldsymbol{\eta}} \quad (4.29)$$

Mithilfe der Substitutionsformel (3.23) für Berezin-Integrale ergibt sich dann

$$\int D_{h,v} f = \det(\mathbf{P}) \det(\mathbf{W})^4 \det(\mathbf{P}^{-1}) \int \hat{D}_{h,v} \hat{f} = \det(\mathbf{W})^4 \int \hat{D}_{h,v} \hat{f} \quad (4.30)$$

für das Integral der Fouriertransformierten $\hat{f}(\hat{\boldsymbol{\eta}}) = f(\boldsymbol{\eta}(\hat{\boldsymbol{\eta}}))$ einer Graßmann-Funktion. Im Anhang wird gezeigt dass $\det(\mathbf{W}) = \pm 1$. Daher stimmen die Integrale sogar überein.

$$\int D_{h,v} f = \int \hat{D}_{h,v} \hat{f} \quad (4.31)$$

Als nächsten Schritt muss eine darstellende Matrix für die fouriertransformierte Wirkung gefunden werden. Dazu wird einfach der Ausdruck (4.24) in (4.21) eingesetzt. Dies sei zunächst etwas allgemeiner vorgeführt.

$$\begin{aligned} \sum_{j=0}^{N-1} \eta_{x_j}^\nu \eta_{x_j+b}^{\nu'} &= \sum_{x_j \in \Lambda} \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{k} \in \bar{\Lambda}} \hat{\eta}_{\mathbf{k}}^\nu e^{-i\mathbf{k} \cdot x_j} \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{k}' \in \bar{\Lambda}} \hat{\eta}_{\mathbf{k}'}^{\nu'} e^{-i\mathbf{k}' \cdot (x_j+b)} \\ &= \sum_{\mathbf{k} \in \bar{\Lambda}} \sum_{\mathbf{k}' \in \bar{\Lambda}} e^{-i\mathbf{k}' \cdot b} \hat{\eta}_{\mathbf{k}}^\nu \hat{\eta}_{\mathbf{k}'}^{\nu'} \frac{1}{N} \sum_{x_j \in \Lambda} e^{-i(\mathbf{k}+\mathbf{k}') \cdot x_j} \\ &= \sum_{\mathbf{k} \in \bar{\Lambda}} \sum_{\mathbf{k}' \in \bar{\Lambda}} e^{-i\mathbf{k}' \cdot b} \hat{\eta}_{\mathbf{k}}^\nu \hat{\eta}_{\mathbf{k}'}^{\nu'} \delta(\mathbf{k} + \mathbf{k}') \\ &= \sum_{\mathbf{k} \in \bar{\Lambda}} e^{i\mathbf{k} \cdot b} \hat{\eta}_{\mathbf{k}}^\nu \hat{\eta}_{-\mathbf{k}}^{\nu'} \end{aligned}$$

Entsprechende Substitutionen für \mathbf{b} , η^ν und $\eta^{\nu'}$ ergeben alle Terme der transformierten Graßmann-Wirkung \hat{A} .

$$\begin{aligned}\hat{A} &= \hat{A}_{bond} + \hat{A}_{corner} + \hat{A}_{monomer} \\ \hat{A}_{bond} &= \sum_{\mathbf{k} \in \bar{\Lambda}} t e^{ik_1} \hat{h}_{\mathbf{k}}^x \hat{h}_{-\mathbf{k}}^o + t e^{ik_2} \hat{v}_{\mathbf{k}}^x \hat{h}_{-\mathbf{k}}^o \\ \hat{A}_{corner} &= - \sum_{\mathbf{k} \in \bar{\Lambda}} h_{\mathbf{k}}^x v_{-\mathbf{k}}^o + v_{\mathbf{k}}^x h_{-\mathbf{k}}^o + v_{\mathbf{k}}^o h_{-\mathbf{k}}^o + v_{\mathbf{k}}^x h_{-\mathbf{k}}^x \\ \hat{A}_{monomer} &= - \sum_{\mathbf{k} \in \bar{\Lambda}} h_{\mathbf{k}}^o h_{-\mathbf{k}}^x + v_{\mathbf{k}}^o v_{-\mathbf{k}}^x\end{aligned}$$

Der Anteil $\hat{A}_{monomer}$ kann, unter Beachtung der Antikommutations-Eigenschaft und einer Umindizierung $\mathbf{k}' \rightarrow -\mathbf{k}$, umgeschrieben werden.

$$- \sum_{\mathbf{k} \in \bar{\Lambda}} h_{\mathbf{k}}^o h_{-\mathbf{k}}^x = \sum_{\mathbf{k} \in \bar{\Lambda}} h_{-\mathbf{k}}^x h_{\mathbf{k}}^o = \sum_{\mathbf{k}' \in \bar{\Lambda}} h_{\mathbf{k}'}^x h_{-\mathbf{k}'}^o \quad (4.32)$$

Daher können die Terme von \hat{A}_{bond} und $\hat{A}_{monomer}$ unter Einführung der Koeffizienten $\xi(k)$ zusammengefasst werden.

$$\xi(k) = 1 + t e^{ik} \quad (4.33)$$

Durch Verdoppelung und anschließender Umindizierung $\mathbf{k}' \rightarrow -\mathbf{k}$ aller Terme, kann eine Antisymmetrisierung der Darstellung der Wirkung erreicht werden.

$$\begin{aligned}2\hat{A} &= \sum_{\mathbf{k} \in \bar{\Lambda}} \xi(k_1) \hat{h}_{\mathbf{k}}^x \hat{h}_{-\mathbf{k}}^o + \xi(k_2) \hat{v}_{\mathbf{k}}^x \hat{v}_{-\mathbf{k}}^o - \xi(-k_1) \hat{h}_{\mathbf{k}}^o \hat{h}_{-\mathbf{k}}^x - \xi(-k_2) \hat{v}_{\mathbf{k}}^o \hat{v}_{-\mathbf{k}}^x \\ &+ \sum_{\mathbf{k} \in \bar{\Lambda}} -h_{\mathbf{k}}^x v_{-\mathbf{k}}^o - v_{\mathbf{k}}^x h_{-\mathbf{k}}^o - v_{\mathbf{k}}^o h_{-\mathbf{k}}^o - v_{\mathbf{k}}^x h_{-\mathbf{k}}^x + v_{\mathbf{k}}^o h_{-\mathbf{k}}^x + h_{\mathbf{k}}^o v_{-\mathbf{k}}^x + h_{\mathbf{k}}^o v_{-\mathbf{k}}^o + h_{\mathbf{k}}^x v_{-\mathbf{k}}^x\end{aligned}$$

Durch Einführung der Vektoren $\hat{\eta}_{\mathbf{k}} = (\hat{h}_{\mathbf{k}}^o, \hat{h}_{\mathbf{k}}^x, \hat{v}_{\mathbf{k}}^o, \hat{v}_{\mathbf{k}}^x)$ und der Matrizen $\hat{\mathbf{A}}_{\mathbf{k}}$ lässt sich die folgende Darstellung erreichen.

$$\hat{A} = \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k} \in \bar{\Lambda}} \hat{\eta}_{\mathbf{k}}^T \hat{\mathbf{A}}_{\mathbf{k}} \hat{\eta}_{-\mathbf{k}} \quad (4.34)$$

$$\hat{\mathbf{A}}_{\mathbf{k}} = \begin{pmatrix} 0 & -\xi(-k_1) & 1 & 1 \\ \xi(k_1) & 0 & -1 & 1 \\ -1 & 1 & 0 & -\xi(-k_2) \\ -1 & -1 & \xi(k_2) & 0 \end{pmatrix} \quad (4.35)$$

Der Graßmann-Vektor $\hat{\eta}$ der fouriertransformierte Variablen lässt sich als Zusammenfassung der Vektoren $\hat{\eta}_{\mathbf{k}}$ auffassen.

$$\hat{\eta} = (\hat{h}_{\mathbf{k}_1}^o, \hat{h}_{\mathbf{k}_1}^x, \hat{v}_{\mathbf{k}_1}^o, \hat{v}_{\mathbf{k}_1}^x, \dots, \hat{h}_{\mathbf{k}_N}^o, \hat{h}_{\mathbf{k}_N}^x, \hat{v}_{\mathbf{k}_N}^o, \hat{v}_{\mathbf{k}_N}^x) = (\hat{\eta}_{\mathbf{k}_0}, \hat{\eta}_{\mathbf{k}_1}, \dots, \hat{\eta}_{\mathbf{k}_N})$$

Damit kann man dann aus (4.34) die darstellende Matrix $\hat{\mathbf{A}}$ der Graßmann-Wirkung \hat{A} ablesen.

Darstellende Matrix der fouriertransformierten Graßmann-Wirkung \hat{A}

$$\hat{A} = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} \hat{A}_{k_0} & 0 & \cdots & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & 0 & \cdots & 0 & \hat{A}_{k_1} & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 & \cdots & \hat{A}_{k_{2M(M+1)}} \\ 0 & \hat{A}_{k_{2M(M+1)+1}} & \cdots & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & \hat{A}_{k_N} & 0 & \cdots & 0 \end{pmatrix} \quad (4.36)$$

Da $\xi(k) = -\xi(-k)$ nur für $k = 2\mathbb{N}\pi$ erfüllt ist, kann nur \hat{A}_{k_0} , mit $k_0 = (0, 0)$, antisymmetrisch sein. Für die übrigen \hat{A}_{k_i} gilt jedoch $-\hat{A}_{k_i}^T = \hat{A}_{-k_i}$. Aufgrund der gewählten Nummerierung der Gitterpunkte folgt dann $\hat{A}_{-k_i} = \hat{A}_{k_{i+2M(M+1)}}$. Daher ist die Matrix \hat{A} insgesamt antisymmetrisch und somit eindeutig bezüglich dieses Satzes von Graßmann-Variablen.

5. Exakte Berechnung der horizontalen Spin-Spin-Korrelation

Zur Berechnung der Magnetisierung wird die Korrelation zweier beliebig weit entfernter Spins benötigt. Da das Gitter isotrop und homogen ist, reicht es aus sich auf die Berechnung der horizontalen Spin-Spin-Korrelation $\langle \sigma_{0,0} \sigma_{m,0} \rangle$ zu beschränken. Diese soll nun in diesem Abschnitt berechnet werden.

5.1. Spin-Spin-Korrelationen ausgedrückt als Graßmann-Korrelationen

Ausgangspunkt ist Gleichung (4.9), mithilfe der sich die Spin-Spin-Korrelation $\langle \sigma_i \sigma_j \rangle$ als Quotient zweier Zustandssummen schreiben lässt. Die Zustandssumme im Zähler ist dabei die eines defekten Gitters. Die Gitterdefekte, sowie die zugehörigen Gitterpunkte, zusammengefasst in L_D , liegen in diesem Fall alle auf einer Geraden parallel zur x-Achse.

$$L_D = \{x \mid \exists l \in \{0, \dots, m-1\} : x = (l, 0)\} \quad (5.1)$$

Da sich die Vorfaktoren der Zustandssummen kürzen, kann dieser Ausdruck mithilfe von (4.22) als Quotient zweier Berezin-Integrale geschrieben werden.

$$\langle \sigma_{x,y} \sigma_{x+m,y} \rangle = \frac{t^m \tilde{Z}_D}{\tilde{Z}} \approx \frac{t^m \text{Sp}(e^{A_D})}{\text{Sp}(e^A)} \quad (5.2)$$

Die Gleichheit gilt wieder nur asymptotisch im Thermodynamischen Limes. A ist dabei die Graßmann-Wirkung des isotropen 2d Ising-Gitters und A_D die des defekten Gitters. Diese stehen über (5.3) miteinander in Zusammenhang.

$$A_D = A - \sum_{x \in \Lambda_D} t h_x^x h_{x+e_x}^o + \sum_{x_k \in \Lambda_D} t^{-1} h_{x_k}^x h_{x_k+e_x}^o \quad (5.3)$$

Unter Verwendung der Tatsache dass Paare von Graßmann Variablen kommutieren und (5.3) lässt sich e^{A_D} dann gemäß

$$\begin{aligned} e^{A_D} &= e^A \prod_{x \in \Lambda_D} \exp\left((t^{-1} - t) h_x^x h_{x+e_x}^o\right) \\ &= e^A \prod_{x \in \Lambda_D} 1 + (t^{-1} - t) h_x^x h_{x+e_x}^o \\ &= e^A \prod_{l=0}^{m-1} 1 + (t^{-1} - t) h_{l,0}^x h_{l+1,0}^o \end{aligned} \quad (5.4)$$

umschreiben. Setzt man (5.4) in (5.2) ein, erkennt man dass sich die Spin-Spin-Korrelation als Korrelation einer Graßmann-Funktion schreiben lässt.

$$\langle \sigma_{x,y} \sigma_{x+m,y} \rangle = \frac{t^m \text{Sp}(e^{A_D})}{\text{Sp}(e^A)} = t^m \left\langle \prod_{l=0}^{m-1} 1 + (t^{-1} - t) h_{l,0}^x h_{l+1,0}^o \right\rangle$$

Durch Ausmultiplizieren des Produktes und unter Verwendung der Linearität der Korrelation lässt sich die Spin-Spin-Korrelation als Summe von Graßmann-Korrelationen beschreiben.

$$\prod_{l=0}^{m-1} 1 + (t^{-1} - t) h_{l,0}^x h_{l+1,0}^o = 1 + \sum_{k=1}^m (t^{-1} - t)^k \sum_{l_1 < \dots < l_k} h_{l_1,0}^x h_{l_1+1,0}^o \cdots h_{l_k,0}^x h_{l_k+1,0}^o \quad (5.5)$$

Spin-Spin-Korrelation als Summe von Graßmann-Korrelationen

$$\langle \sigma_{0,0} \sigma_{m,0} \rangle = t^m + \sum_{k=1}^m t^{m-k} (1 - t^2)^k \sum_{l_1 < \dots < l_k} \langle h_{l_1,0}^x h_{l_1+1,0}^o \cdots h_{l_k,0}^x h_{l_k+1,0}^o \rangle \quad (5.6)$$

5.2. Berechnung von Graßmann-Paar-Korrelationen

Um (3.51) zur Berechnung der Korrelationen nutzen zu können, muss die darstellende Matrix der Graßmann-Dichte e^A bekannt sein. Da die darstellende Matrix für den Satz fouriertransformierter Graßmann-Variablen eine einfache Gestalt hat, bietet es sich an die Berechnung für diese durchzuführen und dann über die Fouriertransformation die ursprüngliche Korrelation zu berechnen.

5.2.1. Fouriertransformation der Korrelationen

Aufgrund der Homogenität und der periodischen Randbedingungen sind die Graßmann-Korrelationen translationsinvariant. Daher ergibt sich

$$\langle \eta_{x_l}^\nu \eta_{x_{l'}}^{\nu'} \rangle = \frac{1}{N} \sum_{x \in \Lambda} \langle \eta_{x_l+x}^\nu \eta_{x_{l'}+x}^{\nu'} \rangle \quad (5.7)$$

Dabei indiziert ν , wie schon in Abschnitt 4.5, wieder eine der vier Familien von Graßmann-Variablen auf dem Gitter. Durch Einsetzen der Definition (4.24) für die Fouriertransformation in die Graßmann-Paar-Korrelation, erhält man die folgende Darstellung in den fouriertransformierten Variablen.

$$\begin{aligned} \frac{1}{N} \sum_{x \in \Lambda} \langle \eta_{x_l+x}^\nu \eta_{x_{l'}+x}^{\nu'} \rangle &= \frac{1}{N} \sum_{x \in \Lambda} \left\langle \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{k \in \bar{\Lambda}} \hat{\eta}_k^\nu e^{-ik \cdot (x_l+x)} \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{k' \in \bar{\Lambda}} \hat{\eta}_{k'}^{\nu'} e^{-ik' \cdot (x_{l'}+x)} \right\rangle \\ &= \frac{1}{N} \sum_{k \in \bar{\Lambda}} \sum_{k' \in \bar{\Lambda}} e^{-i(k \cdot x_l + k' \cdot x_{l'})} \langle \hat{\eta}_k^\nu \hat{\eta}_{k'}^{\nu'} \rangle \frac{1}{N} \sum_{x \in \Lambda} e^{-i(k+k') \cdot x} \\ &= \frac{1}{N} \sum_{k \in \bar{\Lambda}} \sum_{k' \in \bar{\Lambda}} e^{-i(k \cdot x_l + k' \cdot x_{l'})} \langle \hat{\eta}_k^\nu \hat{\eta}_{k'}^{\nu'} \rangle \delta(k + k') \\ &= \frac{1}{N} \sum_{k \in \bar{\Lambda}} e^{-ik \cdot (x_l - x_{l'})} \langle \hat{\eta}_k^\nu \hat{\eta}_{-k}^{\nu'} \rangle \end{aligned}$$

Die Korrelationen die zur Berechnung von (5.6) benötigt werden, liegen alle auf einer Linie parallel zur x-Achse. Daher ergibt sich letztlich die folgenden Darstellungen für die Fouriertransformation der horizontalen Korrelationen.

Fouriertransformierte horizontale Graßmann-Korrelationen

$$\langle \eta_{(l,0)}^\nu \eta_{(l',0)}^{\nu'} \rangle = \frac{1}{N} \sum_{k \in \bar{\Lambda}} e^{-i(l-l')k_1} \langle \hat{\eta}_k^\nu \hat{\eta}_{-k}^{\nu'} \rangle \quad (5.8)$$

5.2.2. Korrelationen im K-Raum

Zur Berechnung der Paar-Korrelationen im K-Raum nutzt man die Formel (3.51) zur Berechnung der Korrelation über die Inverse der darstellende Matrix der Graßmann-Dichte. Danach ergibt sich

$$\langle \hat{\eta}_k^\nu \hat{\eta}_{-k}^{\nu'} \rangle_{\Lambda_N} = \frac{\text{Sp}(e^{\hat{A}} \hat{\eta}_k^\nu \hat{\eta}_{-k}^{\nu'})}{\text{Sp}(e^{\hat{A}})} = pf(-(2\hat{A}^{-1})^{II}) \quad (5.9)$$

als zu berechnender Ausdruck. $I = \{i_1, i_2\}$ ist dabei die Indexmenge der relevanten Zeilen und Spalten. i_1 ist der zu $\hat{\eta}_k^\nu$ gehörige und i_2 der zu $\hat{\eta}_{-k}^{\nu'}$ gehörige Index. Aufgrund der gewählten Numerierung der Gitterpunkte, gilt $i_1 < i_2$. Die Matrix $(\hat{A}^{-1})^{II}$ erhält man durch Streichen

aller Zeilen und Spalten von \mathbf{A} , deren Indices nicht in I liegen. In diesem Fall handelt es sich um eine 2×2 Matrix, deren Pfaffsche Determinante

$$\text{pf}\left((-2\hat{\mathbf{A}})^{-1}\right) = \text{pf}\begin{pmatrix} 0 & -((2\hat{\mathbf{A}})^{-1})_{i_1, i_2} \\ -((2\hat{\mathbf{A}})^{-1})_{i_2, i_1} & 0 \end{pmatrix} = -((2\hat{\mathbf{A}})^{-1})_{i_1, i_2} \quad (5.10)$$

vollständig durch $(2\hat{\mathbf{A}}^{-1})_{i_1, i_2}$ bestimmt ist. Bei der Berechnung dieses Matricelements kommt einem die Blockmatrix-Form von $\hat{\mathbf{A}}$ zugute, welche bei der Inversion ebenfalls erhalten bleibt. Unter Beachtung der Tatsache dass $\hat{\mathbf{A}}_{-k_i} = \hat{\mathbf{A}}_{k_{i+2M(M+1)}}$ gilt, überprüft man leicht durch nachrechnen, dass die Inverse der Matrix $\hat{\mathbf{A}}$ die folgende Form haben muss.

$$(2\hat{\mathbf{A}})^{-1} = \left(\begin{array}{c|ccc|ccc} \hat{\mathbf{A}}_{k_0}^{-1} & 0 & \cdots & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ \hline 0 & 0 & \cdots & 0 & \hat{\mathbf{A}}_{-k_1}^{-1} & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 & \cdots & \hat{\mathbf{A}}_{-k_{2M(M+1)}}^{-1} \\ \hline 0 & \hat{\mathbf{A}}_{k_1}^{-1} & \cdots & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & \hat{\mathbf{A}}_{k_{2M(M+1)}}^{-1} & 0 & \cdots & 0 \end{array} \right) \quad (5.11)$$

Das Matricelement das zu I gehört, liegt dann in der Matrix $\hat{\mathbf{A}}_{-k}^{-1}$. Spalte und Zeile in $\hat{\mathbf{A}}_{-k}^{-1}$ werden dann von der Familie der zugehörigen Graßmann-Variablen bestimmt. Einzelne Matricelemente der 4×4 Matrix lassen sich mithilfe der Cramer'schen Regel bestimmen. Die Matrizen $\hat{\mathbf{A}}_k$ wurde in Abschnitt 4.5 aufgestellt. Ihre Struktur ist hier noch einmal aufgeschlüsselt.

$$\hat{\mathbf{A}}_k : \begin{array}{c|cc|cc} & \hat{h}_{-k}^o & \hat{h}_{-k}^x & \hat{v}_{-k}^o & \hat{h}_{-k}^x \\ \hline \hat{h}_k^o & 0 & -\xi(-k_1) & 1 & 1 \\ \hline \hat{h}_k^x & \xi(k_1) & 0 & -1 & 1 \\ \hline \hat{v}_k^o & -1 & 1 & 0 & -\xi(-k_2) \\ \hline \hat{v}_k^x & -1 & -1 & \xi(k_2) & 0 \end{array} \quad (5.12)$$

Für die Berechnung der Inversen mit der Cramer'schen Regel wird die Determinante

$$\det(\hat{\mathbf{A}}_k) = \xi(k_1)\xi(-k_1)\xi(k_2)\xi(-k_2) - (\xi(k_1) + \xi(-k_1))(\xi(k_2) + \xi(-k_2)) + 4 \quad (5.13)$$

der Matrix $\hat{\mathbf{A}}_k$ benötigt. Mithilfe der Zwischenergebnisse

$$\begin{aligned} \xi(k) + \xi(-k) &= 2(1 + t \cos(k)) \\ \xi(k)\xi(-k) &= 1 + 2t \cos(k) + t^2 \end{aligned}$$

kann dieses Ergebnis weiter aufgelöst werden. Nach einigen weiteren algebraischen Umformung erhält man dann

$$\det(\hat{\mathbf{A}}_k) = (1 + t^2)^2 - 2t(1 - t^2)(\cos(k_1) + \cos(k_2)) \quad (5.14)$$

für die Determinante. Nun müssen die einzelnen Fälle explizit unterschieden werden. Für $\langle \hat{h}_k^x \hat{h}_{-k}^o \rangle$ ergibt sich

$$((2\hat{\mathbf{A}})^{-1})_{i_1, i_2} = ((\hat{\mathbf{A}}_{-k})^{-1})_{2,1}$$

für das zu bestimmende Matrixelement. Mit der Cramer'schen Regel ergibt sich dann

$$\begin{aligned} \det(\hat{\mathbf{A}}_{-k}) ((\hat{\mathbf{A}}_{-k})^{-1})_{2,1} &= \begin{vmatrix} 0 & 1 & 1 & 1 \\ \xi(-k_1) & 0 & -1 & 1 \\ -1 & 0 & 0 & -\xi(k_2) \\ -1 & 0 & \xi(-k_2) & 0 \end{vmatrix} \\ &= \xi(k_2) + \xi(-k_2) - \xi(-k_1)\xi(k_2)\xi(-k_2) \end{aligned}$$

Unter Ausnutzung der Symmetrie $\det(\hat{\mathbf{A}}_{-k}) = \det(\hat{\mathbf{A}}_k)$ folgt dann

$$\text{pf}(-(2\mathbf{A}^{-1})^{II}) = \frac{\xi(-k_1)\xi(k_2)\xi(-k_2) - \xi(k_2) - \xi(-k_2)}{\det(\hat{\mathbf{A}}_k)}$$

und somit

Horizontale Graßmann-Paar-Korrelation im K-Raum

$$\langle \hat{h}_k^x \hat{h}_{-k}^o \rangle_{\Lambda_N} = \frac{\xi(-k_1)\xi(k_2)\xi(-k_2) - \xi(k_2) - \xi(-k_2)}{(1+t^2)^2 - 2t(1-t^2)(\cos(k_1) + \cos(k_2))} \quad (5.15)$$

Für die anderen zwei Korrelationen verfährt man analog. Für $\langle \hat{h}_k^o \hat{h}_{-k}^o \rangle$ muss man das Matrixelement $-((\hat{\mathbf{A}}_{-k})^{-1})_{1,1}$ und für $\langle \hat{h}_k^x \hat{h}_{-k}^x \rangle$ das Matrixelement $-((\hat{\mathbf{A}}_{-k})^{-1})_{2,2}$ berechnen. Man erhält dann, nach dem Rückeinsetzen für $\xi(\cdot)$, das folgende Ergebnis.

$$\langle \hat{h}_k^o \hat{h}_{-k}^o \rangle_{\Lambda_N} \propto \langle \hat{h}_k^x \hat{h}_{-k}^x \rangle_{\Lambda_N} \propto \frac{2i \sin(k_2)}{(1+t^2)^2 - 2t(1-t^2)(\cos(k_1) + \cos(k_2))} \quad (5.16)$$

5.2.3. Übergang in den Thermodynamischen Limes

Wenn man an die Definition (4.23) der Vektoren \mathbf{k} zurückdenkt, so erkennt man mit der Korrespondenz

$$\mathbf{k} = (k_1, k_2) = \left(\frac{2\pi q_1}{2M+1}, \frac{2\pi q_2}{2M+1} \right) \quad (5.17)$$

dass

$$\frac{1}{N} = \frac{1}{(2M+1)^2} = \Delta q_1 \Delta q_2 = \frac{\Delta k_1}{2\pi} \frac{\Delta k_2}{2\pi} \quad (5.18)$$

gilt. Damit kann der Ausdruck in (5.8) dann als Riemann-Summe identifiziert werden. Diese konvergiert dann im Thermodynamischen Limes gegen ein Integral über die gesamte erste Brillouin-Zone.

$$\sum_{\mathbf{k} \in \tilde{\Lambda}} e^{-i(l-l')k_1} \langle \hat{\eta}_{\mathbf{k}}^y \hat{\eta}_{-\mathbf{k}}^{y'} \rangle_{\Lambda_N} \frac{\Delta k_1}{2\pi} \frac{\Delta k_2}{2\pi} \xrightarrow[\Delta k_2 \rightarrow 0]{\Delta k_1 \rightarrow 0} \frac{1}{(2\pi)^2} \int_{-\pi}^{\pi} \int_{-\pi}^{\pi} dk_1 dk_2 e^{-i(l-l')k_1} \langle \hat{\eta}_{\mathbf{k}}^y \hat{\eta}_{-\mathbf{k}}^{y'} \rangle_{\Lambda_N}$$

Mit den Substitutionen

$$\kappa = 2t(1 - t^2) \quad (5.19)$$

$$\gamma = (1 + t^2)^2 \quad (5.20)$$

$$\Omega(k_1) = \gamma - \kappa \cos(k_1) \quad (5.21)$$

folgt für das Integral der Korrelation $\langle h_{(l,0)}^x h_{(l',0)}^x \rangle$

$$\frac{1}{(2\pi)^2} \int_{-\pi}^{\pi} \int_{-\pi}^{\pi} dk_1 dk_2 e^{-i(l-l')k_1} \langle \hat{h}_{\mathbf{k}}^x \hat{h}_{-\mathbf{k}}^x \rangle_{\Lambda_N} \propto \int_{-\pi}^{\pi} dk_2 \frac{\sin(k_2)}{\Omega(k_1) - \kappa \cos(k_2)} = 0,$$

da der Integrand eine ungerade Funktion in k_2 ist. Die Korrelation $\langle h_{(l,0)}^o h_{(l',0)}^o \rangle$ verschwindet dann ebenfalls im Thermodynamischen Limes. Für die verbliebene Korrelation setzt man schließlich den Ausdruck (5.15) für die Graßmann-Korrelation im Integral ein. Zusammengefasst erhält man dann das folgende Ergebnis.

Horizontale Graßmann-Korrelationen für das unendliche 2d Ising-Gitter

$$\langle h_{(l,0)}^x h_{(l',0)}^o \rangle = \frac{1}{(2\pi)^2} \int_{-\pi}^{\pi} \int_{-\pi}^{\pi} dk_1 dk_2 e^{-i(l-l')k_1} \frac{F_{\xi}(k_1, k_2)}{\Delta(k_1, k_2)} \quad (5.22)$$

$$F_{\xi}(k_1, k_2) = \xi(-k_1)\xi(k_2)\xi(-k_2) - \xi(k_2) - \xi(-k_2) \quad (5.23)$$

$$\Delta(k_1, k_2) = (1 + t^2)^2 - 2t(1 - t^2)(\cos(k_1) + \cos(k_2)) \quad (5.24)$$

$$\langle h_{(l,0)}^x h_{(l',0)}^x \rangle = \langle h_{(l,0)}^o h_{(l',0)}^o \rangle = 0 \quad (5.25)$$

5.3. Berechnung der Spin-Spin-Korrelationen

Ausgangspunkt ist Gleichung (5.6) nach der sich

$$\langle \sigma_{0,0} \sigma_{m,0} \rangle = t^m + \sum_{k=1}^m t^{m-k} (1 - t^2)^k \sum_{l_1 < \dots < l_k} \langle h_{l_1,0}^x h_{l_1+1,0}^o \cdots h_{l_k,0}^x h_{l_k+1,0}^o \rangle$$

für den Zusammenhang zwischen Spin-Spin-Korrelation und Graßmann-Korrelationen ergibt. Durch Auswerten der Graßmann-Korrelationen als Paar-Korrelationen wird nun gezeigt, dass sich die Spin-Spin-Korrelation als Determinante einer geeigneten Matrix C schreiben lässt, deren Einträge durch die bereits berechneten Graßmann-Paar-Korrelationen bestimmt ist.

Es sei nun $I = \{l_1, \dots, l_k\}$ die Indexmenge der Korrelationen $\langle h_{l_1,0}^x h_{l_1+1,0}^o \cdots h_{l_k,0}^x h_{l_k+1,0}^o \rangle$. Mit (3.52) erhält man dann

$$\langle h_{l_1,0}^x h_{l_1+1,0}^o \cdots h_{l_k,0}^x h_{l_k+1,0}^o \rangle = \left\langle \prod_{l \in I} h_{l,0}^x h_{l+1,0}^o \right\rangle = pf(\mathbf{M}_I) \quad (5.26)$$

für die Korrelationen. Die Matrix \mathbf{M}_I ist gemäß

$$\mathbf{M}_I = \begin{pmatrix} \langle h_{l_1,0}^x h_{l_1,0}^x \rangle & \langle h_{l_1,0}^x h_{l_1+1,0}^o \rangle & \langle h_{l_1,0}^x h_{l_2+1,0}^o \rangle & \cdots & \langle h_{l_1,0}^x h_{l_k+1,0}^o \rangle \\ \langle h_{l_1+1,0}^o h_{l_1,0}^x \rangle & \langle h_{l_1+1,0}^o h_{l_1+1,0}^o \rangle & \langle h_{l_1+1,0}^o h_{l_2+1,0}^o \rangle & \cdots & \langle h_{l_1+1,0}^o h_{l_k+1,0}^o \rangle \\ \langle h_{l_2,0}^x h_{l_1,0}^x \rangle & \langle h_{l_2,0}^x h_{l_1+1,0}^o \rangle & \langle h_{l_2,0}^x h_{l_2+1,0}^o \rangle & \cdots & \langle h_{l_2,0}^x h_{l_k+1,0}^o \rangle \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \langle h_{l_k+1,0}^o h_{l_1,0}^x \rangle & \langle h_{l_k+1,0}^o h_{l_1+1,0}^o \rangle & \langle h_{l_k+1,0}^o h_{l_2+1,0}^o \rangle & \cdots & \langle h_{l_k+1,0}^o h_{l_k+1,0}^o \rangle \end{pmatrix} \quad (5.27)$$

definiert. Die Hälfte der Einträge in \mathbf{M}_I sind jedoch Null, denn nach dem früheren Ergebnis (5.25) gilt $\langle h_{l,0}^x h_{l',0}^x \rangle = \langle h_{l,0}^o h_{l',0}^o \rangle = 0$. Mithilfe der Matrix $\tilde{\mathbf{C}}_{l,l'} = \langle h_{l-1,0}^x h_{l',0}^o \rangle$ lässt sich die Gestalt der Matrix \mathbf{M}_I dann erheblich vereinfachen.

$$\mathbf{M}_I = \begin{pmatrix} 0 & \tilde{\mathbf{C}}_{l_1,l_1} & 0 & \tilde{\mathbf{C}}_{l_1,l_2} & \cdots & \tilde{\mathbf{C}}_{l_1,l_k} \\ -\tilde{\mathbf{C}}_{l_1,l_1} & 0 & -\tilde{\mathbf{C}}_{l_2,l_1} & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & \tilde{\mathbf{C}}_{l_2,l_1} & 0 & \tilde{\mathbf{C}}_{l_2,l_2} & \cdots & \tilde{\mathbf{C}}_{l_2,l_k} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ -\tilde{\mathbf{C}}_{l_1,l_k} & 0 & -\tilde{\mathbf{C}}_{l_2,l_k} & 0 & \cdots & 0 \end{pmatrix} \quad (5.28)$$

Durch eine entsprechende Permutation P der Zeilen und Spalten lassen sich weitere Vereinfachungen vornehmen.

$$P^T \mathbf{M}_I P = \begin{pmatrix} 0 & \cdots & 0 & \tilde{\mathbf{C}}_{l_1,l_1} & \cdots & \tilde{\mathbf{C}}_{l_1,l_k} \\ \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & \cdots & 0 & \tilde{\mathbf{C}}_{l_k,l_1} & \cdots & \tilde{\mathbf{C}}_{l_k,l_k} \\ -\tilde{\mathbf{C}}_{l_1,l_1} & \cdots & -\tilde{\mathbf{C}}_{l_k,l_1} & 0 & \cdots & 0 \\ \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ -\tilde{\mathbf{C}}_{l_1,l_k} & \cdots & -\tilde{\mathbf{C}}_{l_k,l_k} & 0 & \cdots & 0 \end{pmatrix} =: \begin{pmatrix} \mathbf{0} & \tilde{\mathbf{C}}^{II} \\ -(\tilde{\mathbf{C}}^{II})^T & \mathbf{0} \end{pmatrix} \quad (5.29)$$

Für das Vorzeichen der Permutation P gilt $\text{sign}(P) = \det(P) = (-1)^{k(k-1)/2}$, wie in Abb. 9 veranschaulicht. Mithilfe der Anti-Diagonalblock-Formel (3.40) für Pfaffsche Determinanten erhält man dann, dass sich die Korrelationen als Hauptminoren der Matrix $\tilde{\mathbf{C}}$ schreiben lassen.

$$\begin{aligned} \left\langle \prod_{l \in I} h_{l,0}^x h_{l+1,0}^o \right\rangle &= \text{pf} \left(P \begin{pmatrix} \mathbf{0} & \tilde{\mathbf{C}}^{II} \\ -(\tilde{\mathbf{C}}^{II})^T & \mathbf{0} \end{pmatrix} P^T \right) \\ &= ((-1)^{k(k-1)/2})^2 \det(\tilde{\mathbf{C}}^{II}) = \det(\tilde{\mathbf{C}}^{II}) \end{aligned} \quad (5.30)$$

Mithilfe eines Satzes aus der Linearen Algebra lässt sich damit die Spin-Spin-Korrelation, in der Form (5.6), auf das charakteristische Polynom der Matrix $\tilde{\mathbf{C}}$ zurückführen (Beweis des Satzes in Appendix E).

Satz über die Koeffizienten des charakteristischen Polynoms

Sei $A \in \mathbb{C}^{m \times m}$ eine beliebige komplexe Matrix. Die Koeffizienten des charakteristischen Polynoms lassen sich gemäß (5.32) mithilfe der Hauptminoren $\det(A^{II})$ der Matrix A ausdrücken. $A^{II} \in \mathbb{C}^{k \times k}$ erhält man indem man die Zeilen und Spalten mit Indices, die nicht in $I \subseteq \{1, \dots, n\}$ liegen, in A streicht.

$$p_A(\lambda) = \det(A - \lambda) = (-1)^m \lambda^m + \sum_{k=0}^{m-1} (-1)^k E_{m-k} \lambda^k \quad (5.31)$$

$$E_k = \sum_{\substack{\#I=k \\ I \subseteq \{1, \dots, m\}}} \det(A^{II}) \quad (5.32)$$

Mithilfe der Identifikation von (5.32) und (5.30) kann man Zusammenhang

$$\sum_{l_1 < \dots < l_k} \langle h_{l_1,0}^x h_{l_1+1,0}^o \cdots h_{l_k,0}^x h_{l_k+1,0}^o \rangle = \sum_{\substack{\#I=k \\ I \subseteq \{1, \dots, m\}}} \det(\tilde{C}^{II}) = E_k \quad (5.33)$$

erkennen. Aus Vergleich von (5.31) und (5.6) ergibt sich dann schließlich die Spin-Spin-Korrelation als das charakteristische Polynom der Matrix $(1 - t^2)\tilde{C}$ ausgewertet an der Stelle $\lambda = -t$.

$$\begin{aligned} \langle \sigma_{0,0} \sigma_{m,0} \rangle &= t^m + \sum_{k=1}^m t^{m-k} (1 - t^2)^k \sum_{\substack{\#I=k \\ I \subseteq \{1, \dots, m\}}} \det(\tilde{C}^{II}) \\ &= (-1)^m (-t)^m + \sum_{k'=0}^{m-1} t^{k'} (1 - t^2)^{m-k'} \sum_{\substack{\#I=m-k' \\ I \subseteq \{1, \dots, m\}}} \det(\tilde{C}^{II}) \\ &= (-1)^m (-t)^m + \sum_{k'=0}^{m-1} (-1)^{k'} (-t)^{k'} \sum_{\substack{\#I=m-k' \\ I \subseteq \{1, \dots, m\}}} \det((1 - t^2)\tilde{C}^{II}) \\ &= \det((1 - t^2)\tilde{C} - (-t)) \\ &= \det(t + (1 - t^2)\tilde{C}) \end{aligned}$$

Exakte Lösung für Spin-Spin-Korrelation

$$\langle \sigma_{0,0} \sigma_{m,0} \rangle = \det(C^{I_m I_m}) \quad (5.34)$$

$$C_{l,l'} = t \delta_{l,l'} + (1 - t^2) \langle h_{l-1,0}^x h_{l',0}^o \rangle \quad (5.35)$$

$$I_m = \{1, 2, \dots, m\}$$

Aufgrund der Translationsinvarianz der Graßmann-Paar-Korrelationen, gilt

$$C_{l,l+r} = t\delta_{l,l+r} + (1 - t^2) \langle h_{l-1,0}^x h_{l+r,0}^o \rangle = t\delta_{0,r} + (1 - t^2) \langle h_{0,0}^x h_{1+r,0}^o \rangle \quad (5.36)$$

für die Einträge der Matroix C . Die Einträge hängen also nur von der Differenz $r = l - l'$ ab und sind konstant entlang der Diagonalen. Eine solche Matrix nennt man auch Toeplitz-Matrix.

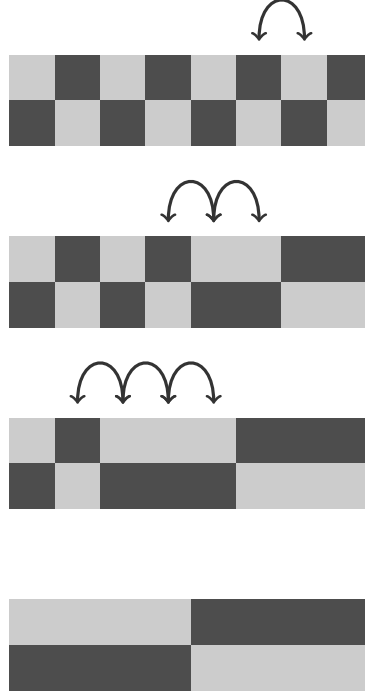


Abbildung 9: Veranschaulichung der Permutation P der Zeilen bzw. Spalten von M_l

6. Exakte Berechnung der spontanen Magnetisierung

Zu Berechnung der spontanen Magnetisierung \mathcal{M}_S wird die Definition (2.14) über die langreichweitige Spin-Spin-Korrelation l^* genutzt.

$$\mathcal{M}_S = n\mu l^* = n\mu \lim_{m \rightarrow \infty} \sqrt{\langle \sigma_{0,0} \sigma_{m,0} \rangle} \quad (6.1)$$

Die benötigte horizontale Spin-Spin-Korrelation lässt sich als Determinante einer komplexen $m + 1 \times m + 1$ Toeplitz-Matrix schreiben. Mit steigenden m wird die Berechnung zunehmend komplizierter. Zur Berechnung des Grenzwertes der Determinante wird nun die von Elliott W. Montroll, Renfrey B. Potts und John C. Ward verwendete Methode angewandt [2]. Dazu wird der starke Szegő Grenzwertsatz benötigt. Eine Formulierung dieses Satzes sei im Folgenden angegeben.

Starker Grenzwertsatz von Szegö [12]

Es sei

$$f(\omega) = \sum_{k=-\infty}^{\infty} \hat{f}(k) e^{ik\omega} \quad (6.2)$$

eine Funktion, welche die folgenden Kriterien

$$\sum_{k=-\infty}^{\infty} |\hat{f}(k)| < \infty \quad , \quad \sum_{k=-\infty}^{\infty} |\hat{f}(k)|^2 |k| < \infty \quad (6.3)$$

erfüllt, die keine Nullstellen

$$\forall \omega \in [-\pi, \pi] : f(\omega) \neq 0 \quad (6.4)$$

auf dem Definitionsintervall besitzt und deren Windungszahl

$$[\arg(f)]_{-\pi}^{\pi} = 0 \quad (6.5)$$

verschwindet. Dann gilt mit

$$D_m(f) = \det(M) \quad \text{mit } M_{i,j} = \hat{f}(i-j) \quad (6.6)$$

dass im Limes $m \rightarrow \infty$

$$\ln D_m(f) = (m+1)\hat{s}(0) + \sum_{k=1}^{\infty} k\hat{s}(k)\hat{s}(-k) + o(1) \quad (6.7)$$

gilt, wobei

$$\hat{s}(k) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\pi}^{\pi} \ln(f(\omega)) e^{-ik\omega} d\omega \quad (6.8)$$

Der starke Szegö Grenzwertsatz liefert damit den Grenzwert einer Folge von Determinanten von Töplitz-Matrizen mit Einträgen $M_{i,j} = \hat{f}(i-j)$, welche sich als Fourier-Koeffizienten einer geeigneten Funktion $f(\omega)$ darstellen lassen. Um diesen Satz für $\det(C)$ anwenden zu können, muss also eine geeignete Darstellung der Matrix C gefunden werden.

6.1. Vorbereitung für Szegö-Grenzwertsatz

Da sich die benötigten Ausdrücke $\langle h_{l-1,0}^x h_{l',0}^o \rangle$ für die Graßmann-Korrelationen nach dem Übergang in den Thermodynamischen Limes als ein, einem Fourier-Integral ähnlichen, Integral (5.22) schreiben lässt, folgt mit

$$\delta_{l,l+r} = \frac{1}{(2\pi)^2} \int_{-\pi}^{\pi} \int_{-\pi}^{\pi} dk_1 dk_2 e^{irk_1} \quad (6.9)$$

und

$$\langle h_{(l-1,0)}^x h_{(l+r,0)}^o \rangle = \frac{1}{(2\pi)^2} \int_{-\pi}^{\pi} \int_{-\pi}^{\pi} dk_1 dk_2 e^{i(r+1)k_1} \frac{F_{\xi}(k_1, k_2)}{\Delta(k_1, k_2)} \quad (6.10)$$

aufgrund der Linearität des Integrals, der Ausdruck

$$C_{l,l+r} = \frac{1}{(2\pi)^2} \int_{-\pi}^{\pi} \int_{-\pi}^{\pi} dk_1 dk_2 \left(t e^{irk_1} + (1-t^2) e^{i(r+1)k_1} \frac{F_{\xi}(k_1, k_2)}{\Delta(k_1, k_2)} \right) \quad (6.11)$$

für die Koeffizienten der Matrix C . Der Integrand wird auf gleichen Nenner gebracht

$$t e^{irk_1} + (1-t^2) e^{i(r+1)k_1} \frac{F_{\xi}(k_1, k_2)}{\Delta(k_1, k_2)} = e^{irk_1} \frac{t \Delta(k_1, k_2) + (1-t^2) e^{ik_1} F_{\xi}(k_1, k_2)}{\Delta(k_1, k_2)}$$

und anschließend der Zähler durch Rückeinsetzen explizit berechnet.

$$t \Delta(k_1, k_2) + (1-t^2) e^{ik_1} F_{\xi}(k_1, k_2) = 2t(1+t^2) - t^2(1-t^2) e^{-ik_1} - (1-t^2) e^{ik_1} \quad (6.12)$$

Der Zähler hängt nun nicht mehr von k_2 ab. Die Integration über k_2 kann explizit ausgeführt werden. Mithilfe der Substitutionen (5.19) bis (5.21) für κ , γ und Ω ergibt sich

$$\Delta(k_1, k_2) = \Omega - \kappa \cos(k_2) \quad (6.13)$$

Durch Nachrechnen erhält man

$$\frac{\gamma}{\kappa} = \frac{(1+t^2)^2}{2t(1-t^2)} > 2 \quad \text{für } t \in [0, 1] \quad (6.14)$$

und daher

$$\frac{\kappa}{\Omega} = \frac{\kappa}{\gamma - \kappa \cos(k_1)} = \frac{1}{\frac{\gamma}{\kappa} - \cos(k_1)} < 1 \quad (6.15)$$

Mit der Identität

$$\int_{\pi}^{\pi} \frac{dx}{1 - a \cos x} = \frac{2\pi}{\sqrt{1-a^2}} \quad \text{für } |a| < 1 \quad (6.16)$$

ergibt sich das Integral über k_2 dann zu

$$\frac{1}{2\pi} \int_{-\pi}^{\pi} dk_2 \frac{1}{\Delta(k_1, k_2)} = \frac{1}{2\pi} \int_{-\pi}^{\pi} dk_2 \frac{1}{\Omega - \kappa \cos k_2} = \frac{1}{\sqrt{\Omega^2 - \kappa^2}} \quad (6.17)$$

sodass man insgesamt

$$C_{l,l+r} = \frac{1}{2\pi} \int_{-\pi}^{\pi} dk_1 e^{irk_1} \frac{2t(1+t^2) - t^2(1-t^2) e^{-ik_1} - (1-t^2) e^{ik_1}}{\sqrt{\Omega^2 - \kappa^2}} \quad (6.18)$$

als Darstellung für die Elemente der Matrix C erhält. Damit das ganze nun mit der Definition des Fourier-Integrals in Szegös Grenzwertsatz übereinstimmt, wird mit $\omega = -k_1$ substituiert. Insgesamt ergibt sich dann die folgende Darstellung.

$$C_{l,l+r} = \frac{1}{2\pi} \int_{-\pi}^{\pi} d\omega e^{-ir\omega} \frac{\tilde{f}(\omega)}{\sqrt{\Omega^2 - \kappa^2}} \quad (6.19)$$

$$\tilde{f}(\omega) = 2t(1+t^2) - t^2(1-t^2)e^{i\omega} - (1-t^2)e^{-i\omega} \quad (6.20)$$

Wie in [2] soll nun die Funktion

$$\delta^*(\omega) = \frac{1}{2i} \ln \left(\frac{(1-tt^*e^{i\omega})(t-t^*e^{-i\omega})}{(1-tt^*e^{-i\omega})(t-t^*e^{i\omega})} \right) \quad (6.21)$$

eingeführt werden, wobei

$$t^* = \frac{(1-t)}{(1+t)} \quad (6.22)$$

gilt. Die Darstellung der Matricelemente kann dadurch weiter vereinfacht werden. Im Appendix F wird gezeigt dass

$$e^{2i\delta^*} = \frac{\tilde{f}^2}{\Omega^2 - \kappa^2} \quad (6.23)$$

gilt. Damit folgt dann

$$\pm e^{i\delta^*} = \frac{\tilde{f}}{\sqrt{\Omega^2 - \kappa^2}} \quad (6.24)$$

Da für die Spin-Spin-Korrelation im Grenzfall

$$C_{1,1} = \langle \sigma_{0,0} \sigma_{1,0} \rangle \xrightarrow{T \rightarrow 0} 1 \quad (6.25)$$

gelten muss, wird, da $\delta(\omega) \xrightarrow{T \rightarrow 0} 0$ gilt, in (6.24) das positive Vorzeichen gewählt. Zusammengefasst erhält man dann das folgende Resultat.

Darstellung der Matricelemente $C_{l,l+r}$ als Fourier-Koeffizienten

$$C_{l,l+r} = \frac{1}{2\pi} \int_{-\pi}^{\pi} d\omega e^{-ir\omega} e^{i\delta^*} \quad (6.26)$$

$$i\delta^*(\omega) = \frac{1}{2} \ln \left(\frac{(1-tt^*e^{i\omega})(t-t^*e^{-i\omega})}{(1-tt^*e^{-i\omega})(t-t^*e^{i\omega})} \right) \quad (6.27)$$

Es folgt

$$i\delta^*(-\omega) = -i\delta^*(\omega)$$

für $\omega \in [-\pi, \pi]$ und $i\delta^*(-\pi) = i\delta^*(\pi) = 0$, da $e^{-i\pi} = -1 = e^{i\pi}$ gilt. Zudem ist $i\delta^*$ als Logarithmuss einer rationalen Funktion ohne Polstellen auf dem Einheitskreis eine holomorphe Funktion in $z = e^{i\omega}$ für alle $t \in (0, 1)$. Daher ist $i\delta^*$ zumindest 2 mal stetig differenzierbar in $\omega \in [-\pi, \pi]$. Somit existiert die Fourier-Reihe von $e^{i\delta^*}$. Diese konvergiert zudem dann gleichmäßig gegen die Funktion und die Reihe selbst konvergiert normal (d.h. wie in (6.3) gefordert). Zudem konvergiert die, durch gliedweise Differentiation erhaltene, Reihe auch normal, wodurch sich

$$\sum_{k=-\infty}^{\infty} |\hat{f}(k)|^2 |k| < \sum_{k=-\infty}^{\infty} |\hat{f}(k)|^2 |k|^2 < \left(\sum_{k=-\infty}^{\infty} |\hat{f}(k)| |k| \right)^2 < \infty \quad (6.28)$$

ergibt. Die Funktion $e^{i\delta^*}$ erfüllt daher alle Voraussetzungen des starken Grenzwertsatzes von Szegö.

6.2. Die kritische Temperatur T_C

Um nun den Satz von Szegö zu benutzen müssen die Größen $\hat{s}(k)$ berechnet werden. Da $f = e^{i\delta^*}$ gilt, folgt $\ln(f) = i\delta^*$ und daher

$$\hat{s}(0) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\pi}^{\pi} d\omega \, i\delta^*(\omega) = 0 \quad (6.29)$$

da $i\delta^*$ eine ungerade Funktion in ω ist. Zur Berechnung der Fourier-Koeffizienten von $\ln(f)$ wird $i\delta^*$, wie in [2], mithilfe der Reihendarstellung des Logarithmus in eine Laurent-Reihe entwickelt.

$$i\delta^* = \frac{1}{2} \ln \left(\frac{(1 - tt^* e^{i\omega})(1 - \frac{t^*}{t} e^{-i\omega})}{(1 - tt^* e^{-i\omega})(1 - \frac{t^*}{t} e^{i\omega})} \right) \quad (6.30)$$

Um die Reihen-Darstellung des Logarithmus verwenden zu können, muss jedoch sowohl $tt^* < 1$ als auch $t^* < t$ gelten. Während erstere Bedingung immer erfüllt ist, führt die zweite Bedingung auf die Ungleichung

$$(1 - t) < (1 + t)t \quad (6.31)$$

bzw. durch umformen

$$\sqrt{2} - 1 < t \quad (6.32)$$

für den Parameter t . Über die Definition des Parameters $t = \tanh(\frac{J}{k_B T})$ ergibt sich dann

$$\frac{J}{k_B T} > \operatorname{atanh}(\sqrt{2} - 1) = \frac{1}{2} \ln \left(\frac{1 + (\sqrt{2} - 1)}{1 - (\sqrt{2} - 1)} \right) = \frac{1}{2} \ln(1 + \sqrt{2}) \quad (6.33)$$

als Bedingung für die Temperatur. Dadurch lässt sich eine kritische Temperatur T_c für das System definieren.

Kritische Temperatur T_C

$$T_C := \frac{2J}{\ln(1 + \sqrt{2}) k_B} \quad (6.34)$$

6.3. Magnetisierung für $T < T_C$

Für den Fall $T < T_C$ gilt

$$t^* < t$$

und es lässt sich die vorherige Darstellung (6.30) für $i\delta^*$ verwenden. Hier wird analog zu [2] vorgegangen. Durch Anwendung der Rechenregeln für den Logarithmus erhält man dann

$$i\delta^* = \frac{1}{2} \left(\ln(1 - tt^* e^{i\omega}) + \ln\left(1 - \frac{t^*}{t} e^{-i\omega}\right) - \ln((1 - tt^* e^{-i\omega}) - \ln\left(1 - \frac{t^*}{t} e^{i\omega}\right)) \right)$$

und mithilfe der Reihendarstellung

$$\ln(1-x) = \sum_{k=1}^{\infty} -\frac{x^k}{k}$$

ergibt sich dann

$$\begin{aligned} i\delta^* &= \frac{1}{2} \left(\sum_{k=1}^{\infty} -\frac{(tt^*)^k}{k} e^{ik\omega} - \frac{(t^*)^k}{t^k k} e^{-ik\omega} + \frac{(tt^*)^k}{k} e^{-ik\omega} + \frac{(t^*)^k}{t^k k} e^{ik\omega} \right) \\ &= \left(\sum_{k=1}^{\infty} \left(\frac{(t^*)^k}{t^k} - (tt^*)^k \right) \frac{1}{2k} e^{ik\omega} + \left((tt^*)^k - \frac{(t^*)^k}{t^k} \right) \frac{1}{2k} e^{-ik\omega} \right) \end{aligned} \quad (6.35)$$

Aus dieser Darstellung lässt sich

$$\hat{s}(k) = -\hat{s}(-k) = \frac{1}{2k} \left(\frac{(t^*)^k}{t^k} - (tt^*)^k \right)$$

für die Fourier-Koeffizienten der Funktion $\ln(f)$ ablesen. Damit folgt

$$\hat{s}(k)\hat{s}(-k) = -\frac{1}{4k} \left(\frac{((tt^*)^2)^k}{k} + \left(\frac{(t^*)^2}{t^2} \right)^k \frac{1}{k} - 2 \frac{((t^*)^2)^k}{k} \right) \quad (6.36)$$

und somit

$$\begin{aligned} \sum_{k=1}^n k\hat{s}(k)\hat{s}(-k) &= -\frac{1}{4} \sum_{k=1}^{\infty} \left(\frac{((tt^*)^2)^k}{k} + \left(\frac{(t^*)^2}{t^2} \right)^k \frac{1}{k} - 2 \frac{((t^*)^2)^k}{k} \right) \\ &= \frac{1}{4} \left(\ln(1 - (tt^*)^2) + \ln\left(1 - \frac{(t^*)^2}{t^2}\right) - 2\ln(1 - (t^*)^2) \right) \\ &= \ln \left(\left(\frac{(1 - (tt^*)^2)(1 - \frac{(t^*)^2}{t^2})}{(1 - (t^*)^2)^2} \right)^{\frac{1}{4}} \right) \end{aligned}$$

Durch Rücksubstitution und Umformung folgt

$$\ln \left(\left(\frac{(1 - (tt^*)^2)(1 - \frac{(t^*)^2}{t^2})}{(1 - (t^*)^2)^2} \right)^{\frac{1}{4}} \right) = \frac{1}{4} \ln \left(1 - \frac{(1 - t^2)^4}{16t^4} \right) \quad (6.37)$$

wie in Appendix F ausführlich bewiesen wird. Für den Grenzübergang mit $D_m = \det(C^{I_m I_m})$ folgt dann aufgrund des starken Szegö Grenzwertsatzes

$$\lim_{m \rightarrow \infty} \ln(D_m) = \frac{1}{4} \ln \left(1 - \frac{(1 - t^2)^4}{16t^4} \right)$$

Dabei wurde $\hat{s}(0) = 0$ verwendet. Für die spontane Magnetisierung ergibt sich letztlich

$$\frac{\mathcal{M}_S}{n\mu} = \lim_{m \rightarrow \infty} \sqrt{D_m} = \left(1 - \frac{(1-t^2)^4}{16t^4}\right)^{\frac{1}{8}}$$

Als letztes erfolgt die Rücksubstitution des Systemparameters $t = \tanh(\frac{J}{k_B T})$.

$$\frac{1-t^2}{16t^4} = \frac{1}{\sinh(\frac{J}{k_B T})^4 \cosh(\frac{J}{k_B T})^4} = \frac{1}{\sinh(\frac{2J}{k_B T})^4}$$

Spontane Magnetisierung für $T < T_C$

$$\mathcal{M}_S = n\mu \left(1 - \frac{1}{\sinh(\frac{2J}{k_B T})^4}\right)^{\frac{1}{8}} \quad (6.38)$$

6.4. Magnetisierung für $T > T_C$

Für den Fall $T > T_C$ gilt

$$t^* > t$$

und der Ausdruck (6.30) für $i\delta^*$ muss, wie in [2], anders umgeformt werden, um die Reihendarstellung des Logarithmus nutzen zu können. In der Form

$$i\delta^* = \frac{1}{2} \ln \left(\frac{(1-tt^*e^{i\omega})(1-\frac{t}{t^*}e^{-i\omega})}{(1-tt^*e^{-i\omega})(1-\frac{t}{t^*}e^{i\omega})} e^{-2i\omega} \right)$$

kann der Logarithmus auch in der Variable t/t^* in eine Taylorreihe entwickelt werden. Durch anwenden der Rechenregeln und Reihendarstellung des Logarithmus erhält man

$$i\delta^* = \frac{1}{2} \left(\sum_{k=1}^{\infty} -\frac{(tt^*)^k}{k} e^{i\omega k} - \frac{1}{k} \frac{(t)^k}{(t^*)^k} e^{-i\omega k} + \frac{(tt^*)^k}{k} e^{-i\omega k} + \frac{1}{k} \frac{(t)^k}{(t^*)^k} e^{i\omega k} \right) - i\omega$$

Die Gerade $i\omega$ wird am Einheitskreis als imaginäre Sägezahn-Funktion periodisch fortgesetzt. Die Fourierkoeffizienten

$$\frac{1}{2\pi} \int_{-\pi}^{\pi} d\omega \, i\omega e^{-ik\omega} = \frac{\cos(k\pi)}{k} = \frac{(-1)^k}{k}$$

ergeben sich leicht durch partielle Integration. Zusammengefasst in der Darstellung

$$i\delta^* = \sum_{k=1}^{\infty} \frac{1}{2k} \left(\left(\frac{(t)}{(t^*)} \right)^k - (tt^*)^k + 2(-1)^k \right) e^{i\omega k} + \frac{1}{2k} \left((tt^*)^k - \left(\frac{(t)}{(t^*)} \right)^k - 2(-1)^k \right) e^{-i\omega k}$$

erkennt man dass

$$\hat{s}(k) = -\hat{s}(-k) = \frac{1}{2k} \left(\left(\frac{(t)}{(t^*)} \right)^k - (tt^*)^k + 2(-1)^k \right)$$

für die Fourier-Koeffizienten der Funktion $\ln(f) = i\delta^*$ gilt. Damit folgt

$$\hat{s}(k)\hat{s}(-k)k = -\frac{1}{k} - \frac{1}{4k} \left(\left(\frac{(t)}{(t^*)} \right)^k - (tt^*)^k \right)^2 - (-1)^n \left(\left(\frac{(t)}{(t^*)} \right)^k - (tt^*)^k \right)$$

und somit gilt für den Grenzübergang

$$\lim_{m \rightarrow \infty} \ln(D_m) = \lim_{m \rightarrow \infty} \sum_{k=1}^m \hat{s}(k)\hat{s}(-k)k = -\infty$$

da die harmonische Reihe immer divergiert. Somit verschwindet die Magnetisierung für $T > T_C$

Spontane Magnetisierung für $T < T_C$

$$\mathcal{M}_S = n\mu \lim_{m \rightarrow \infty} D_m = 0 \quad (6.39)$$

7. Zusammenfassung und Fazit

Die Ergebnisse (6.38) und (6.39) für die Magnetisierung unterhalb und oberhalb der kritischen Temperatur T_C ergeben zusammengefasst die, erstmals von Lars Onsager aufgestellte, Formel für die spontanen Magnetisierung in Abhängigkeit der Temperatur.

Spontane Magnetisierung des 2d Ising-Modells

$$\mathcal{M}_S = \begin{cases} n\mu \left(1 - \frac{1}{\sinh(\frac{2J}{k_B T})^4} \right)^{\frac{1}{8}} & \text{für } T < T_c \\ 0 & \text{für } T > T_c \end{cases} \quad (7.1)$$

$$T_C := \frac{2J}{\ln(1 + \sqrt{2}) k_B} \quad (7.2)$$

Der Beweis ist damit abgeschlossen. Nebenbei wurde zudem ein Ausdruck für die Zustandssumme abgeleitet, der eine leichte, explizite Berechnung dieser und der Freien Energie des Modells ermöglicht. Dies wird in Appendix A vorgeführt.

Der Ansatz das Problem der Zählung geschlossener Graphen auf dem rechteckigen Gitter, mithilfe einer graphischen Überlegung, in ein algebraisches Problem für Graßmann Zahlen zu übersetzen, bietet nicht nur einen anschaulichen Zugang, sondern ermöglicht die Anwendung

leicht handhabbarer algebraischer Methoden und Hilfsmittel. Zudem gelingt es mit diesem Ansatz nicht nur die Zustandssumme, sondern auch die Magnetisierung mit absehbarem Aufwand zu berechnen.

Aus Sicht der Quantenfeldtheorie wurde das Problem mithilfe der Grassmann Variablen in ein Freies Fermionen Modell übersetzt, das dann mit den, in der QFT üblichen Methoden, behandelt werden kann. Dies war auch Stuart Samuels ursprünglicher Zugang. Dieser Ansatz ist zudem nicht nur auf das Ising-Modell beschränkt, sondern kann auch zu exakten Lösung andere Probleme wie “planar closed-Packed Dimer Problems” genutzt werden [3] [4].

Der starke Grenzwertsatz von Szegő erweist sich als mächtiges Hilfsmittel wenn es um die Berechnung von Grenzwerten von Folgen von Töplitz-Determinanten geht. Töplitz-Matrizen stehen dabei in einem natürlichen Zusammenhang mit den in der Physik häufig auftretenden periodischen Randbedingungen. Die Notwendigkeit des Übergangs in ein unendlich großes System, um physikalische Aussagen treffen zu können, stellt dabei eine häufige Schwierigkeit dar.

Die erbrachte Herleitung weist jedoch einen Mangel auf, welche den hier gelieferten Beweis aus mathematischer Sicht unvollständig macht. Dies wurde in Abschnitt 4.4.4 bereits angesprochen und in Appendix A genauer ausgeführt. Im Temperaturbereich $T < T_C$ hat der, über die Hochtemperatur-Darstellung hergeleitete, Ausdruck für die Zustandssumme zwar den richtigen Absolutbetrag aber das falsche Vorzeichen. Am kritischen Punkt für $T = T_C$ wechselt der berechnete Ausdruck für die Zustandssumme das Vorzeichen. Der Vorzeichenwechsel geht dabei stetig von statten. Eine negative Zustandssumme ist jedoch weder aus mathematischer, noch physikalischer Sicht, sinnvoll, sodass sich hier um einen Fehler handeln muss. Tatsächlich scheint es, als würde es am kritischen Punkt zu einer Art Perkulations-Phänomen kommen, das dafür sorgt, dass die Beiträge der, in Abschnitt 4.4.4 eingeführten, äußeren Graphen nicht mehr im Thermodynamischen Limes verschwinden. Denn diese wurden als einzige mit negativer Gewichtung gezählt. Konkret fehlt es hier an einer qualitativen Abschätzung für die Geschwindigkeit mit der die Beiträge dieser äußeren Graphen verschwinden und einer Abschätzung des Temperaturbereiches in dem diese tatsächlich verschwinden. Dem Autor sind bislang keine Arbeiten bekannt, die diese Themen behandeln würden und auch in anderen Herleitungen, welche die hier verwendeten Methoden zur Lösung des Ising-Modells benutzen, wie [13] [14], oder in den ursprünglichen Arbeiten von Stuart Samuel [3] [4], wird dieses Detail nicht erwähnt.

Für die Berechnung der spontanen Magnetisierung scheint dieses Verhalten jedoch keinen Unterschied zu machen, da diese als Quotient zweier Zustandssummen ausgedrückt werden kann und das Vorzeichen somit keine Rolle spielt. Zudem kann mit den hier besprochenen Methoden auch ein für $T < T_C$ gültiger Ausdruck für die Zustandssumme unter Hinzunahme der sogenannten Tieftemperatur-Darstellung abgeleitet werden. Dies wird ebenfalls in Appendix A gezeigt und stellt keinen wirklichen Mehraufwand dar.

A. Appendix: Explizite Berechnung der Zustandssumme

Es gilt nun den Ausdruck für die Zustandssumme

$$Z = 2^N \cosh(\beta J)^{2N} \sum_{\{G\}} t^{N_K(G)} \quad (\text{A.1})$$

mithilfe der erstmals in (4.22) angegebenen Relation

$$\sum_{\{G\}} t^{N_K(G)} \approx (-1)^N \int D_{h,v} e^A \quad (\text{A.2})$$

explizit auszuwerten. Die Gleichheit ist dabei als asymptotische Annäherung im Thermodynamischen Limes zu verstehen. Das Spurintegral (A.2) lässt sich nach (4.31) als das Berezin-Integral der fouriertransformierten Graßmann-Dichte auswerten.

$$\text{Sp}(e^A) = \text{Sp}(e^{\hat{\eta}^T \hat{A} \hat{\eta}}) = \text{pf}(2\hat{A})$$

Um die nachfolgende Rechnung verständlich zu machen, sei nochmal auf Gleichung (4.36) verwiesen. Dort wird die Struktur der fouriertransformierten Matrix dargestellt. Mithilfe des Satzes über Gauß-Berezin-Integrale (3.30) und den Eigenschaften (3.38) und (3.40) Pfaffscher Determinanten folgt

$$\begin{aligned} \text{pf}(2\hat{A}) &= \text{pf}(\hat{A}_{k_0}) (-1)^{4 \frac{N-1}{2} (4 \frac{N-1}{2} - 1)} \frac{1}{2} \det \begin{pmatrix} \hat{A}_{k_1} & \cdots & 0 \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & \cdots & \hat{A}_{k_{2M(M+1)}} \end{pmatrix} \\ &= \text{pf}(\hat{A}_{k_0}) \prod_{i=1}^{2M(M+1)} \det(\hat{A}_{k_i}) \end{aligned} \quad (\text{A.3})$$

für die Pfaffsche Determinante der fouriertransformierten Matrix. Dabei wurde ausgenutzt das N eine ungerade Zahl ist. Für die explizite Angabe der Zustandssumme müssen die Determinanten, beziehungsweise Pfaffschen Determinanten, der 4×4 Matrizen \hat{A}_k ausgewertet werden. Für $k \in \{k_1, \dots, k_{2M(M+1)}\}$ wurde die Determinante bereits in (5.14) ausgewertet.

$$\det(\hat{A}_k) = (1 + t^2)^2 - 2t(1 - t^2)(\cos(k_x) + \cos(k_y)) \quad (\text{A.4})$$

Die Terme (A.4) sind immer positiv. Denn es gilt

$$\begin{aligned} &(1 + t^2)^2 - 2t(1 - t^2)(\cos(k_x) + \cos(k_y)) \\ &\geq (1 + t^2)^2 - 4t(1 - t^2) \\ &= t^4 + 4t^3 + 2t^2 - 4t + 1 \\ &= (t^2 + 2t - 1)^2 \\ &\geq 0 \end{aligned} \quad (\text{A.5})$$

Mit (3.28) folgt für $\mathbf{k}_0 = (0, 0)$ dass

$$\text{pf}(\hat{\mathbf{A}}_{\mathbf{k}_0}) = t^2 + 2t - 1$$

Mithilfe von $-\hat{\mathbf{A}}_{\mathbf{k}_i}^T = \hat{\mathbf{A}}_{-\mathbf{k}_i} = \hat{\mathbf{A}}_{\mathbf{k}_i+2M(M+1)}$ und der Tatsache, dass es sich um 4×4 Matrizen handelt, kann man Ausdruck (A.3) symmetrisieren.

$$\det(\hat{\mathbf{A}}_{\mathbf{k}_i}) = \sqrt{\det(\hat{\mathbf{A}}_{\mathbf{k}_i})^2} = \sqrt{\det(\hat{\mathbf{A}}_{\mathbf{k}_i}) \det(\hat{\mathbf{A}}_{\mathbf{k}_i+2M(M+1)})} \quad (\text{A.6})$$

Unter Berücksichtigung der verbliebenen Vorfaktoren aus (A.1), (A.2) und mit (A.3) erhält man dann

$$\begin{aligned} Z &= \cosh(\beta J)^{2N} 2^N (-1)^N \text{Sp}(e^A) = (2 \cosh(\beta J)^2)^N (-1)^N \text{pf}(\hat{\mathbf{A}}_{\mathbf{k}_0}) \prod_{\mathbf{k} \in \bar{\Lambda} \setminus \mathbf{0}} \sqrt{\det(\hat{\mathbf{A}}_{\mathbf{k}_i})} \\ &= (2 \cosh(\beta J)^2)^N (-1)^N (t^2 + 2t - 1) \prod_{\mathbf{k} \in \bar{\Lambda} \setminus \mathbf{0}} \sqrt{(1+t^2)^2 - 2t(1-t^2)(\cos(k_1) + \cos(k_2))} \\ &= (2 \cosh(\beta J)^2)^N (1-t^2-2t) \prod_{\mathbf{k} \in \bar{\Lambda} \setminus \mathbf{0}} \sqrt{(1+t^2)^2 - 2t(1-t^2)(\cos(k_1) + \cos(k_2))} \end{aligned}$$

für die Zustandssumme. Identifiziert man, mithilfe von (A.5), zuletzt noch

$$(1-t^2-2t)^2 = (1+t^2)^2 - 4t(1-t^2) = (1+t^2)^2 - 2t(1-t^2)(\cos(0) + \cos(0))$$

so lässt sich die Zustandssumme wie folgt zusammenfassen.

Zustandssumme ausgehend von Hochtemperatur-Darstellung

$$Z = \text{sign}(1-t^2-2t) 2^N \left(\cosh\left(\frac{J}{k_B T}\right) \right)^{2N} \prod_{\mathbf{k} \in \bar{\Lambda}} \sqrt{(1+t^2)^2 - 2t(1-t^2)(\cos(k_1) + \cos(k_2))}$$

Dieses Ergebnis stimmt im Absolutbetrag mit dem aus der Literatur bekannten Resultat von Lars Onsager überein [1], weist jedoch das Problem auf, dass mit

$$1-t^2-2t \begin{cases} > 0 & \text{für } 0 < t < \sqrt{2}-1 \\ = 0 & \text{für } t = \sqrt{2}-1 \\ < 0 & \text{für } \sqrt{2}-1 < t < 1 \end{cases} \quad (\text{A.7})$$

das erhaltenen Ergebnis für die Zustandssumme im möglichen Wertebereich von t verschwindet und sogar negativ wird. Wenn man $t = \tanh\left(\frac{J}{k_B T}\right)$ rückschsubstituiert und analog zu (6.33) umformt, erkennt man, dass der Bereich in dem die Zustandssumme positiv ist, der Bedingung

$$T > \frac{2J}{\ln(1 + \sqrt{2}) k_B} = T_C$$

genügt. Der über die Hochtemperatur-Darstellung errechnete Ausdruck für die Zustandssumme ist also höchstens für Temperaturen $T > T_C$ gültig. Der Vorzeichenwechsel lässt sich auf die negativen Vorzeichen der falsch gewichteten äußeren Graphen, wie in Abschnitt 4.4.4 beschrieben, zurückführen. Es handelt sich hier offenbar um einen methodischen Fehler.

Eine Möglichkeit um das Ergebnis für die Zustandssumme auch für den Temperaturbereich $T < T_C$ zugänglich zu machen ist die zusätzliche Verwendung der Tieftemperatur-Darstellung Z^* der Zustandssumme.

$$Z^* = 2e^{N \frac{2J}{k_B T}} \sum_{\{G\}} e^{-\frac{2J}{k_B T} N_K(G)} \quad (\text{A.8})$$

Eigentlich würden die Graphen G hier auf dem dualen Gitter gezählt werden, aber im Falle eines rechteckigen Gitters sind Gitter und duales Gitter zueinander identisch und daher die Graphen gleich. Für Details zur Tieftemperatur-Darstellung siehe [15]. Die Zustandssumme lässt sich dann analog berechnen, nur dass der Systemparameter t durch $\tau = e^{-\frac{2J}{k_B T}}$ ersetzt wird. Man erhält dann ein ähnliches Ergebnis.

Zustandssumme ausgehend von Tieftemperatur-Darstellung

$$Z^* = \text{sign}(1 - \tau^2 - 2\tau) 2e^{N \frac{2J}{k_B T}} \prod_{\mathbf{k} \in \tilde{\Lambda}} \sqrt{(1 + \tau^2)^2 - 2\tau(1 - \tau^2)(\cos(k_1) + \cos(k_2))}$$

Diese Ergebnis besitzt nach (A.7) im Temperaturbereich $T < T_C = \frac{2J}{\ln(1+\sqrt{2})k_B}$ ein positives Vorzeichen, da dort

$$\ln(\sqrt{2} - 1) = -\ln(\sqrt{2} + 1) > -\frac{2J}{k_B T} = \ln(\tau)$$

gilt. Bis auf das Verhalten des Vorzeichens sind die beiden Lösungen aus physikalischer Sicht gleichwertig, denn nimmt man den Absolutbetrag der Zustandssumme und berechnet über

$$f(T) = \lim_{V, N \rightarrow \infty}^* \frac{-k_B T \ln(|Z(N, T, V)|)}{N} \quad (\text{A.9})$$

die Freie Energie, ergibt sich für beide Darstellungen der gleiche Wert. Aufgrund des Vorzeichens divergiert jedoch der Logarithmus der Zustandssumme in gewissen Temperaturbereichen, was diese Rechnung dort nicht zulässig macht. Eine negative Zustandssumme ist ohnehin aus mathematischer und physikalischer Sicht nicht sinnvoll. Für die folgende Rechnung soll nun ausschließlich der Absolutbetrag betrachtet werden und das Vorzeichen vorerst vernachlässigt werden. Im Falle der Hochtemperatur-Entwicklung ergibt sich dann

$$f(T) = -k_B T \left[\ln(2) + \ln \left(\cosh \left(\frac{J}{k_B T} \right) \right) + \lim_{V, N \rightarrow \infty}^* \frac{1}{2N} \sum_{\mathbf{k} \in \tilde{\Lambda}} \ln \left((1 + t^2)^2 - 2t(1 - t^2)(\cos(k_1) + \cos(k_2)) \right) \right]$$

für die Freie Energie. Die Summe kann mit der Korrespondenz aus (5.17) und (5.18) als Riemannsumme identifiziert werden, welche im Thermodynamischen Limes gegen ein Integral über die gesamte erste Brillouin Zone konvergiert. Der vorliegende Ausdruck kann nun, mit einer im Lehrbuch von Wolfgang Nolting [1] vorgeschlagenen Umformung, weiter vereinfacht werden.

$$\begin{aligned}\ln\left(\cosh\left(\frac{J}{K_B T}\right)\right) &= \ln\left(\frac{1}{\sqrt{1 - \left(\tanh\left(\frac{J}{K_B T}\right)\right)^2}}\right) \\ &= \frac{1}{4} \ln\left((1 - t^2)^{-2}\right) \\ &= \frac{1}{16\pi} \int_{-\pi}^{\pi} \int_{-\pi}^{\pi} dk_1 dk_2 \ln\left((1 - t^2)^{-2}\right)\end{aligned}$$

Damit erhält man dann für die Freie Energie

$$\begin{aligned}\frac{-f(T)}{k_B T} &= \ln(2) + \frac{1}{8\pi} \int_{-\pi}^{\pi} \int_{-\pi}^{\pi} dk_1 dk_2 \ln\left(\frac{(1 + t^2)^2 - 2t(1 - t^2)(\cos(k_1) + \cos(k_2))}{(1 - t^2)^2}\right) \\ &= \frac{1}{8\pi} \int_{-\pi}^{\pi} \int_{-\pi}^{\pi} dk_1 dk_2 \ln\left(4 \frac{(1 + t^2)^2 - 2t(1 - t^2)(\cos(k_1) + \cos(k_2))}{(1 - t^2)^2}\right)\end{aligned}$$

Weitere Umformungen

$$\begin{aligned}\left(\frac{1 + t^2}{1 - t^2}\right)^2 &= \left(\cosh\left(\frac{2J}{k_B T}\right)\right)^2 \\ \left(\frac{2t}{1 - t^2}\right) &= 2 \sinh\left(\frac{J}{k_B T}\right) \cosh\left(\frac{J}{k_B T}\right) = \sinh\left(\frac{2J}{k_B T}\right)\end{aligned}$$

ergeben schließlich den folgenden Ausdruck

$$f(T) = \frac{-k_B T}{8\pi} \int_{-\pi}^{\pi} \int_{-\pi}^{\pi} dk_1 dk_2 \ln\left(4 \left(\cosh\left(\frac{2J}{k_B T}\right)\right)^2 - 4 \sinh\left(\frac{2J}{k_B T}\right)(\cos(k_1) + \cos(k_2))\right)$$

für die Freie Energie pro Gitterpunkt, ausgehend von der Hochtemperatur-Darstellung. Geht man von der Tieftemperatur-Darstellung aus, erhält man

$$\begin{aligned}f(T) &= -k_B T \left[\lim_{V, N \rightarrow \infty}^* \frac{\ln(2)}{N} + \ln\left(e^{\frac{2J}{k_B T}}\right) \right. \\ &\quad \left. + \lim_{V, N \rightarrow \infty}^* \frac{1}{2N} \sum_{k \in \Lambda} \ln\left((1 + \tau^2)^2 - 2\tau(1 - \tau^2)(\cos(k_1) + \cos(k_2))\right) \right]\end{aligned}$$

Der erste Term verschwindet im Thermodynamischen Limes. Mit der Umformung

$$\ln\left(e^{\frac{2J}{k_B T}}\right) = \ln(\tau^{-1}) = \frac{1}{2} \ln(\tau^{-2}) = \frac{1}{8\pi} \int_{-\pi}^{\pi} \int_{-\pi}^{\pi} dk_1 dk_2 \ln(\tau^{-2})$$

erhält man dann für die Freie Energie

$$\begin{aligned} \frac{-f(T)}{k_B T} &= \frac{1}{8\pi} \int_{-\pi}^{\pi} \int_{-\pi}^{\pi} dk_1 dk_2 \ln \left(\frac{(1 + \tau^2)^2 - 2\tau(1 - \tau^2)(\cos(k_1) + \cos(k_2))}{(\tau^2)} \right) \\ &= \frac{1}{8\pi} \int_{-\pi}^{\pi} \int_{-\pi}^{\pi} dk_1 dk_2 \ln \left((\tau^{-1} + \tau)^2 - 2(\tau^{-1} - \tau)(\cos(k_1) + \cos(k_2)) \right) \end{aligned}$$

Durch rückerinsetzen ergibt sich $\tau^{-1} + \tau = 2 \cosh\left(\frac{2J}{k_B T}\right)$ und $\tau^{-1} - \tau = 2 \sinh\left(\frac{2J}{k_B T}\right)$, sodass man dann insgesamt

$$f(T) = \frac{-k_B T}{8\pi} \int_{-\pi}^{\pi} \int_{-\pi}^{\pi} dk_1 dk_2 \ln \left(4 \left(\cosh\left(\frac{2J}{k_B T}\right) \right)^2 - 4 \sinh\left(\frac{2J}{k_B T}\right) (\cos(k_1) + \cos(k_2)) \right)$$

für die Freie Energie pro Gitterpunkt, ausgehend von der Tieftemperatur-Darstellung, erhält. Die Ausdrücke für die Freie Energie stimmen für beide Varianten überein. Außerdem ist der, in (A.10) zusammengefasste, Ausdruck für die Freie Energie jener, der von Lars Onsager erstmals abgeleitet wurde und sich in der gängigen Literatur finden lässt. Das Doppelintegral lässt sich analytisch nicht weiter vereinfachen [1]. .

Expliziter Ausdruck für die Freie Energie des 2d Ising-Modells

$$f(T) = \frac{-k_B T}{8\pi} \int_{-\pi}^{\pi} \int_{-\pi}^{\pi} dk_1 dk_2 \ln \left(4 \left(\cosh\left(\frac{2J}{k_B T}\right) \right)^2 - 4 \sinh\left(\frac{2J}{k_B T}\right) (\cos(k_1) + \cos(k_2)) \right) \quad (\text{A.10})$$

Insgesamt kann man also, durch Kombination der beiden Beschreibungen des Modells, mit der in dieser Arbeit angeführten Methode der Graßmann-Zahlen die Zustandssumme für einen beliebigen Temperaturbereich berechnen.

B. Appendix: Beweise der Eigenschaften Pfaffscher Determinanten mithilfe von Graßmann-Variablen

Es sollen nun die Beweise der Eigenschaften (3.35) bis (3.40) für Pfaffsche Determinanten nachgetragen werden. Diese finden sich in jedem ausführlicherem Lehrbuch über Matrixalgebra und Matrixanalysis, benutzen aber zumeist Aussagen über die Eigenwerte von schiefsymmetrischen Matrizen. Diese Beweise können jedoch auch, zudem sehr elementar, ausschließlich mithilfe der Eigenschaften der Graßmann-Variablen bewiesen werden, ohne tiefere Kenntnisse über die spektralen Eigenschaften antisymmetrischer Matrizen vorauszusetzen. Dies soll nun im Folgenden vorgeführt werden.

Es sei $A \in \mathbb{C}^{2n \times 2n}$ im Folgenden stets eine schiefsymmetrische Matrix, dh $A^T = -A$. Zuerst soll Eigenschaft (3.37) gezeigt werden, also dass für eine beliebige invertierbare Matrix $M \in \mathbb{C}^{2n \times 2n}$

$$\text{pf}(M^T A M) = \det(M) \text{pf}(A)$$

gilt. Diese “Transformationsformel” folgt direkt aus der Transformationsformel (3.23) für das Berezin-Integral. Dazu seien (η_1, \dots, η_n) und $(\theta_1, \dots, \theta_n)$ zwei äquivalente Sätze von Graßmann-Variablen die über $\eta(\theta) = M\theta$ in Verbindung stehen. Benutzt man nun die Definition der Pfaffschen Determinante über das Berezin-Integral, so ergibt sich:

$$\begin{aligned} \det(M) \text{pf}(A) &= \det(M) \int d\eta \exp\left(\frac{1}{2} \eta^T A \eta\right) \\ &= \int d\theta \exp\left(\frac{1}{2} (M\theta)^T A (M\theta)\right) \\ &= \int d\theta \exp\left(\frac{1}{2} \theta^T (M^T A M) \theta\right) \\ &= \text{pf}(M^T A M) \end{aligned}$$

Als nächstes soll Eigenschaft (3.38) als Analogon zur Block-Determinanten-Formel für Pfaffsche Determinanten gezeigt werden. Für schiefsymmetrische Matrizen $A_i \in \mathbb{C}^{2n_i \times 2n_i}$, welche als Blockmatrix $A = \bigoplus_{i=1}^k A_i$ angeordnet werden, soll

$$\text{pf}\left(\bigoplus_{i=1}^k A_i\right) = \prod_{i=1}^k \text{pf}(A_i)$$

gelten. Es soll zuerst aufgezeigt werden, wie sich die Integration einer Graßmann-Funktion $f(\eta_1, \dots, \eta_n)$ verhält, wenn sich diese Funktion als Produkt zweier Funktionen mit unabhängigen “Definitionsbereichen” schreiben lässt. Ohne Beschränkung der Allgemeinheit sei dazu $f(\eta_1, \dots, \eta_n) = f_1(\eta_1, \dots, \eta_k) f_2(\eta_{k+1}, \dots, \eta_n)$ angenommen. Jede andere Abhängigkeit kann, durch Umordnung des Integrationsmaßes und Anpassung des Vorzeichens, analog behandelt

werden. Nun gilt

$$\begin{aligned}
& \int \cdots \int d\eta_1 \cdots d\eta_k f(\eta_1, \dots, \eta_n) \\
&= \int \cdots \int d\eta_1 \cdots d\eta_k f_1(\eta_1, \dots, \eta_k) f_2(\eta_{k+1}, \dots, \eta_n) \\
&= \left(\int \cdots \int d\eta_1 \cdots d\eta_k f_1(\eta_1, \dots, \eta_k) \right) f_2(\eta_{k+1}, \dots, \eta_n) \tag{B.1}
\end{aligned}$$

Da die linke Seite eine Komplexe Zahl ist, kann diese bei abermaliger Integration über die restlichen Variablen vor das Integral gezogen werden. Daher ergibt sich, dass die Spur einer Funktion, welche sich wie angegeben zerlegen lässt, als Produkt der Spuren der Faktoren berechnet werden kann. Um nun die Block-Formel für Pfaffsche Determinante zu zeigen, unterteilt man die Graßmann-Variablen in unterschiedlich große Subsets, von jeweils $2n_i$ Variablen, sodass gilt $\boldsymbol{\eta} = (\eta_1, \dots, \eta_{2n}) = (\boldsymbol{\eta}_1, \dots, \boldsymbol{\eta}_k)$ mit $\boldsymbol{\eta}_i = (\eta_{j_{i,1}}, \dots, \eta_{j_{i,2n_i}})$. Somit ergibt sich, unter Ausnutzung der Tatsache dass Paare von Graßmann Variablen kommutieren, dass

$$\exp\left(\frac{1}{2} \boldsymbol{\eta}^T \mathbf{A} \boldsymbol{\eta}\right) = \exp\left(\frac{1}{2} \boldsymbol{\eta}^T \left(\oplus_{i=1}^k \mathbf{A}_i\right) \boldsymbol{\eta}\right) = \exp\left(\frac{1}{2} \sum_{i=1}^k \boldsymbol{\eta}_i^T \mathbf{A}_i \boldsymbol{\eta}_i\right) = \prod_{i=1}^k \exp\left(\frac{1}{2} \boldsymbol{\eta}_i^T \mathbf{A}_i \boldsymbol{\eta}_i\right)$$

gilt. Da nun jeder Faktor des Produktes nur mehr von einem der Subsets abhängt, kann die Integration über jedes Subset ebenfalls getrennt durchgeführt werden und es ergibt sich

$$\begin{aligned}
\text{pf}(\mathbf{A}) &= \int D_{\boldsymbol{\eta}} \exp\left(\frac{1}{2} \boldsymbol{\eta}^T \left(\oplus_{i=1}^k \mathbf{A}_i\right) \boldsymbol{\eta}\right) \\
&= \int \cdots \int D_{\boldsymbol{\eta}_1} \cdots D_{\boldsymbol{\eta}_k} \prod_{i=1}^k \exp\left(\frac{1}{2} \boldsymbol{\eta}_i^T \mathbf{A}_i \boldsymbol{\eta}_i\right) \\
&= \int D_{\boldsymbol{\eta}_1} \exp\left(\frac{1}{2} \boldsymbol{\eta}_1^T \mathbf{A}_1 \boldsymbol{\eta}_1\right) \left(\int D_{\boldsymbol{\eta}_2} \cdots \left(\int D_{\boldsymbol{\eta}_k} \exp\left(\frac{1}{2} \boldsymbol{\eta}_k^T \mathbf{A}_k \boldsymbol{\eta}_k\right) \right) \cdots \right) \\
&= \prod_{i=1}^k \int D_{\boldsymbol{\eta}_i} \exp\left(\frac{1}{2} \boldsymbol{\eta}_i^T \mathbf{A}_i \boldsymbol{\eta}_i\right) \\
&= \prod_{i=1}^k \text{pf}(\mathbf{A}_i)
\end{aligned}$$

für die Pfaffsche Determinante einer Blockmatrix. Als nächstes geht es um den Beweis der Anti-Diagonalblock-Formel (3.40) für Pfaffsche Matrizen. Dazu sei $\mathbf{M} \in \mathbb{C}^{n \times n}$ beliebig. Es soll

$$\text{pf}\begin{pmatrix} 0 & \mathbf{M} \\ -\mathbf{M}^T & 0 \end{pmatrix} = (-1)^{n(n-1)/2} \det(\mathbf{M})$$

gelten. Um dies einzusehen transformiert zerlegt man die Matrix gemäß

$$\begin{pmatrix} 0 & \mathbf{M} \\ -\mathbf{M}^T & 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & \mathbb{1} \\ \mathbf{M}^T & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & -\mathbb{1} \\ \mathbb{1} & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & \mathbf{M} \\ \mathbb{1} & 0 \end{pmatrix}$$

in ein Produkt von drei Matrizen und berechnet dann die Pfaffsche Determinante für die mittlere Matrix.

$$\begin{aligned}
\text{pf} \begin{pmatrix} 0 & -\mathbb{1} \\ \mathbb{1} & 0 \end{pmatrix} &= \int \cdots \int d\eta_{2n} \cdots d\eta_1 \exp \left(\frac{1}{2} \sum_{i=1}^n -\eta_i \eta_{i+n} + \eta_{i+n} \eta_i \right) \\
&= \int \cdots \int d\eta_{2n} \cdots d\eta_1 \prod_{i=1}^N \exp(-\eta_i \eta_{i+n}) \\
&= \int \cdots \int d\eta_{2n} \cdots d\eta_1 \prod_{i=1}^N (1 - \eta_i \eta_{i+n}) \\
&= \int \cdots \int d\eta_{2n} \cdots d\eta_1 (-1)^n \eta_1 \eta_{1+n} \cdots \eta_n \eta_{2n} + \sum' \quad (B.2)
\end{aligned}$$

(B.3)

Der Term \sum' fasst die Summe aller Produkte von Graßmann-Variablen zusammen, die unter der Integration verschwinden. Somit ergibt sich der Wert der gesuchten Pfaffschen Determinante als $(-1)^n$ mal dem Vorzeichen der Permutation die benötigt wird um die Graßmann-Variablen in die richtige Reihenfolge zu bringen. Das Vorzeichen ergibt sich zu

$$-1^{\sum_{k=1}^{n-1} k} = (-1)^{\frac{(n-1)n}{2}}$$

Diese Permutation wurde bereits in Abb. 9 veranschaulicht. Mithilfe des Blockmatrix-Satzes für Determinanten ergibt sich

$$\det \begin{pmatrix} 0 & M \\ \mathbb{1} & 0 \end{pmatrix} = (-1)^n \det(M),$$

sodass dann mit der vorhin bewiesenen Transformationsformel für Pfaffsche Determinanten die zu beweisende Aussage folgt.

$$\text{pf} \begin{pmatrix} 0 & M \\ -M^T & 0 \end{pmatrix} = (-1)^n \det(M) (-1)^n (-1)^{\frac{n(n-1)}{2}} = (-1)^{\frac{n(n-1)}{2}} \det(M) \quad (B.4)$$

Die verbleibenden, zu zeigenden, Eigenschaften ergeben sich nun aus den bereits Bewiesenen und einer geeigneten Transformation. Zum Beweis der Aussage dass

$$\text{pf}(-A) = (-1)^n \text{pf}(A)$$

gilt, bedient man sich der Transformation

$$-A = i\mathbb{1} A i\mathbb{1}$$

Da die Matrix A gerade Dimension hat, folgt

$$\det(i\mathbb{1}) = i^{2n} = (-1)^n$$

und mit der Transformationsformel für pfaffsche Determinanten erhält man die zu zeigende Eigenschaft. Für die Eigenschaft

$$\text{pf}(\mathbf{A})^2 = \det(\mathbf{A})$$

benutzt man eine in der theoretischen Mechanik gängige Transformation.

$$\mathbf{T} := \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} \mathbb{1} & i\mathbb{1} \\ \mathbb{1} & -i\mathbb{1} \end{pmatrix} \quad (\text{B.5})$$

Unter Verwendung der bislang bewiesenen Eigenschaften lassen sich nun die folgenden Umformungen anstellen

$$\text{pf}(\mathbf{A})^2 = \text{pf} \begin{pmatrix} \mathbf{A} & 0 \\ 0 & \mathbf{A} \end{pmatrix} = \text{pf} \left(\mathbf{T}^T \begin{pmatrix} 0 & \mathbf{A} \\ \mathbf{A} & 0 \end{pmatrix} \mathbf{T} \right) = \det(\mathbf{T}) \text{pf} \begin{pmatrix} 0 & \mathbf{A} \\ -\mathbf{A}^T & 0 \end{pmatrix}$$

Die Determinante dieser Transformation ergibt sich zu

$$\det(\mathbf{T}) := (-i)^n$$

unter Verwendung der Blockmatrix-Formel für Determinanten. Wendet man nun noch die Anti-Diagonalblock-Formel für Pfaffsche Determinanten an, erhält man

$$\text{pf}(\mathbf{A})^2 = (-i)^n (-1)^{\frac{n(n-1)}{2}} \det(\mathbf{A}) = \det(\mathbf{A})$$

Das letzte Gleichheitszeichen ergibt sich, da n gerade ist. Die Aussage über die Pfaffsche Determinante der Inversen

$$\text{pf}(\mathbf{A}^{-1}) = (-1)^n \text{pf}(\mathbf{A})^{-1} = \text{pf}(-\mathbf{A})^{-1}$$

beweist man schnell indem man sich, unter Verwendung des vorher bewiesenen Zusammenhang zur Determinante, den Zusammenhang

$$\text{pf}(\mathbf{A}^T) = \text{pf}(\mathbf{A}\mathbf{A}^{-1}\mathbf{A}^T) = \det(\mathbf{A}) \text{pf}(\mathbf{A}^{-1}) = \text{pf}(\mathbf{A})^2 \text{pf}(\mathbf{A}^{-1})$$

klar macht. Benutzt man die Tatsache das \mathbf{A} schiefsymmetrisch ist, folgt

$$\text{pf}(\mathbf{A}^T) = \text{pf}(-\mathbf{A}) = (-1)^n \text{pf}(\mathbf{A})$$

Die zu beweisende Aussage folgt dann durch Division mit $\text{pf}(\mathbf{A})^2$. Zuletzt bleibt noch zu zeigen, dass die Definition der Pfaffschen Determinante als Gauß-Berezin-Integral verschwindet, falls \mathbf{A} eine quadratische Matrix ungerader Dimension ist. Sei $\mathbf{A} \in \mathbb{C}^{2k+1 \times 2k+1}$ eine beliebige antisymmetrische Matrix. Dann lässt sich der Integrand als

$$\begin{aligned} \exp(\boldsymbol{\eta}^T \mathbf{A} \boldsymbol{\eta}) &= \prod_{i=1}^{2n+1} \prod_{j=1}^{2n+1} e^{A_{ij} \eta_i \eta_j} \\ &= \left(\prod_{i=1}^{2n} \prod_{j=1}^{2n} e^{A_{ij} \eta_i \eta_j} \right) \left(\prod_{k=1}^{2n+1} e^{A_{2n+1,k} \eta_{2n+1} \eta_k} \right) \\ &= \left(\prod_{i=1}^{2n} \prod_{j=1}^{2n} e^{A_{ij} \eta_i \eta_j} \right) \left(\prod_{k=1}^{2n} e^{A_{2n+1,k} \eta_{2n+1} \eta_k} \right) \end{aligned}$$

Produkt von Exponentialfunktion schreiben. Dabei wurde abermals verwendet, dass Paare von Graßmann-Variablen kommutieren. Der rechte Faktor lässt sich, durch ausnutzen der Eigenschaft dass Quadrate von Graßmann-Variablen verschwinden, zu

$$\prod_{k=1}^{2n} e^{A_{2n+1\,k} \eta_{2n+1} \eta_k} = \prod_{k=1}^{2n} (1 + A_{2n+1\,k} \eta_{2n+1} \eta_k) = \sum_{k=1}^n A_{2n+1\,k} \eta_{2n+1} \eta_k$$

umformen. Teilt man die Graßmann-Monome, welche als eine mögliche Basis \mathcal{B} der Graßmann-Algebra dient, in zwei Subsets

$$\mathcal{B}^+ := \{\phi \mid \exists k \in \mathbb{N} : \phi = \eta_{i_1} \cdots \eta_{i_{2k}}, \quad i_1 < \cdots < i_{2k}\} \subset \mathcal{B} \quad (\text{B.6})$$

$$\mathcal{B}^- := \{\phi \mid \exists k \in \mathbb{N} : \phi = \eta_{i_1} \cdots \eta_{i_{2k+1}}, \quad i_1 < \cdots < i_{2k+1}\} \subset \mathcal{B}$$

so erhält man für den rechten Faktor

$$\prod_{i=1}^{2n} \prod_{j=1}^{2n} e^{A_{ij} \eta_i \eta_j} = \prod_{i=1}^{2n} \prod_{j=1}^{2n} (1 + A_{ij} \eta_i \eta_j) = 1 + \sum_{\phi \in \mathcal{B}^+} f_\phi \phi$$

durch ausmultiplizieren. Dabei sind f_ϕ geeignete Koeffizienten die sich durch Produkte der A_{ij} beim ausmultiplizieren ergeben. Der Integrand lässt sich dann gemäß

$$\begin{aligned} \exp(\eta^T A \eta) &= \left(\sum_{k=1}^n A_{2n+1\,k} \eta_{2n+1} \eta_k \right) \left(1 + \sum_{\phi \in \mathcal{B}^+} f_\phi \phi \right) \\ &= \eta_{2n+1} \left(\sum_{\psi \in \mathcal{B}^-} f_\psi \psi \right) \end{aligned}$$

faktorisieren. Dabei stellen die f_ψ wieder geeignete Koeffizienten dar. Der rechte Faktor entsteht, da jedes gerade Monom beim Ausmultiplizieren der Summen mit einer Graßmann-Variable multipliziert wird und so alle ungeraden Monome entstehen. Man beachte dass die 1 weder in \mathcal{B}^- noch in \mathcal{B}^+ enthalten ist. Aufgrund der erreichten Faktorisierung kann nun bei der Spurbildung die Integration über η_{2k+1} vorgezogen werden. Übrig bleibt das Integral

$$\exp(\eta^T A \eta) = \int \cdots \int d\eta_{2n} \cdots d\eta_1 \sum_{\psi \in \mathcal{B}^-} f_\psi \psi = 0 \quad (\text{B.7})$$

für die Berechnung der Spur. Dieses Verschwindet jedoch, da das “Integrationsmaß” eine gerade Anzahl von Graßmann-Variablen beinhaltet, die Monome aber nur aus einer ungeraden Anzahl von Variablen bestehen. Damit ist die zu zeigende Aussage bewiesen.

C. Appendix: Permutationen

Eine bijektive Abbildung $P : \{1, \dots, n\} \rightarrow \{1, \dots, n\}$ heißt Permutation. Die Menge S_n aller solcher Abbildungen heißt die symmetrische Gruppe. Das Vorzeichen $\text{sign}(P)$ einer Permutation kann auf zwei äquivalenten Weisen definiert werden:

- Das Vorzeichen einer Permutation ist definiert als $(-1)^n$, wobei n die Anzahl der Paarvertauschungen ist, die nötig sind um $\{1, \dots, n\}$ in $P(\{1, \dots, n\})$ überzuführen.
- Das Vorzeichen einer Permutation ist definiert als $(-1)^n$ wobei n die Anzahl der Fehlstände der Permutation ist. Ein Fehlstand ist ein Paar (i, j) mit $i < j \in \{1, \dots, n\}$ sodass gilt $P(i) > P(j)$.

Da diese beiden Definitionen äquivalent sind wird in jedem Standardwerk zur Linearen Algebra oder Kombinatorik bewiesen. Eine Nachschlagemöglichkeit wäre zum Beispiel [16]. Ein mit Permutationen eng verwandtes Symbol ist das Levi-Civita-Symbol $\epsilon_{j_1, \dots, j_n}$.

$$\epsilon_{j_1, \dots, j_n} = \begin{cases} \text{sign}(P) & \text{falls } \exists P \in S_n : \forall k \in \{1, \dots, n\} : P(k) = j_k \\ 0 & \text{sonst} \end{cases}$$

D. Appendix: Fouriermatrix auf 2d Gitter

Die diskreten 2d Fouriertransformation für ein Matrix-Signal $X(\mathbf{q}) = X(q_1, q_2) = X_{q_1, q_2}$ im Ortsraum, auf einem $L \times L$ Gitter, ist gegeben durch

$$X_{q_1, q_2} = \sum_{p_1=1}^L \sum_{p_2=1}^L W_{q_1, q_2, p_1, p_2}^{(L)} \hat{X}_{p_1, p_2} \quad (\text{D.1})$$

$$W_{q_1, q_2, p_1, p_2}^{(L)} := \exp\left(i \frac{2\pi}{L} q_1 p_1\right) \exp\left(i \frac{2\pi}{L} q_2 p_2\right) = U_{q_1, p_1}^{(L)} U_{q_2, p_2}^{(L)}$$

Dabei beschreiben q_1, q_2 die diskreten Koordinaten auf dem Gitter im Ortsraum, p_1, p_2 die diskreten Koordinaten in der ersten Brioullin-Zone und \hat{X} das fouriertransformierte Signal. Die Matrix $U^{(L)}$ beschreibt die Matrix einer eindimensionalen Fouriertransformation

$$U_{k,l}^{(L)} := \exp\left(i \frac{2\pi}{L} kl\right) \quad (\text{D.2})$$

Die inverse eindimensionale Transformation wird durch die Matrix

$$\left((U^{(L)})^{-1}\right)_{k,l} := \exp\left(-i \frac{2\pi}{L} kl\right)$$

beschrieben. Somit ist auch die zweidimensionale Transformation invertierbar. Die, die Transformation definierende Gleichung (D.1) lässt sich gänzlich als Matrixgleichung formulieren.

$$X_{q_1, q_2} = \sum_{p_1=1}^L \sum_{p_2=1}^L U_{q_1, p_1}^{(L)} U_{q_2, p_2}^{(L)} \hat{X}_{p_1, p_2} = \left((U^{(L)})^T \hat{X} U^{(L)} \right)_{q_1, q_2} \quad (\text{D.3})$$

Ziel ist es nun diesen Zusammenhang als Vektorgleichung zu formulieren und eine darstellende Matrix $T^{(L)}$ für die Transformation zu finden.

Dazu müssen die Matrix-Signale vektorisiert werden. Dabei bezeichnet

$$\text{vec}(\mathbf{X}) = \begin{pmatrix} \mathbf{x}_1 \\ \vdots \\ \mathbf{x}_L \end{pmatrix}$$

die Vektorisierung des Matrixsignals

$$\mathbf{X} = (\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_L) = \left(\begin{pmatrix} X_{1,1} \\ \vdots \\ X_{L,1} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} X_{1,2} \\ \vdots \\ X_{L,2} \end{pmatrix} \cdots \begin{pmatrix} X_{1,L} \\ \vdots \\ X_{L,L} \end{pmatrix} \right)$$

wobei $\mathbf{x}_j = (X_{1,j}, \dots, X_{L,j})$ die Spalten des Matrix-Signals sind. Das Kronecker-Produkt zweier Matrizen $\mathbf{A} \in \mathbb{C}^{n \times m}$ und $\mathbf{B} \in \mathbb{C}^{k \times l}$ ist eine $nk \times ml$ Matrix, gegeben durch

$$\mathbf{A} \otimes \mathbf{B} := \begin{pmatrix} A_{1,1}\mathbf{B} & \cdots & A_{1,m}\mathbf{B} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ A_{n,1}\mathbf{B} & \cdots & A_{n,m}\mathbf{B} \end{pmatrix}$$

Mithilfe des Kronecker-Produktes lässt sich die Gleichung (D.3) in vektorisierter Form schreiben [17].

$$\text{vec}(\mathbf{X}) = \left(\left(\mathbf{U}^{(L)} \right)^T \otimes \left(\mathbf{U}^{(L)} \right)^T \right) \text{vec}(\hat{\mathbf{X}}) \quad (\text{D.4})$$

Da die Matrix der eindimensionalen Fouriertransformation symmetrisch ist, erhält man

$$\mathbf{W}^{(L)} = \mathbf{U}^{(L)} \otimes \mathbf{U}^{(L)}$$

für die darstellende Matrix der diskreten 2d Fouriertransformation. Mithilfe des folgenden Satzes lässt sich eine Aussage über den Wert der Determinante von $\mathbf{W}^{(L)}$ machen.

Satz übe die Determinante von Kronecker-Produkt-Matrizen [17]

Seien $\mathbf{A} \in \mathbb{C}^{n \times n}$ und $\mathbf{B} \in \mathbb{C}^{k \times k}$ zwei Matrizen, so gilt:

$$\det(\mathbf{A} \otimes \mathbf{B}) = \det(\mathbf{A})^k \det(\mathbf{B})^n \quad (\text{D.5})$$

Da die 1d Fouriermatrix die Gleichung $\left(\mathbf{U}^{(L)} \right)^4 = \mathbf{1}$ erfüllt, gilt für die Determinante der Matrix

$$\det\left(\mathbf{U}^{(L)}\right) \in \{1, i, -1, -i\}$$

und daher für die Matrix der 2d Transformation

$$\det\left(\mathbf{W}^{(L)}\right) \in \{1, -1\}$$

E. Appendix: Satz über Koeffizienten des charakteristischen Polynoms

Der in (5.31) und (5.32) formulierte Satz über die Koeffizienten des charakteristischen Polynoms $p_A(\lambda) = \det(A - \lambda)$ lässt sich für $A \in \mathbb{C}^{3 \times 3}$ explizit wie in (E.1) verstehen

$$\det(A - \lambda) = -\lambda + E_1\lambda^2 - E_2\lambda + E_3 \quad (\text{E.1})$$

$$E_1 = A_{1,1} + A_{2,2} + A_{3,3} = \text{Sp}(A)$$

$$E_2 = \det \begin{pmatrix} A_{1,1} & A_{1,2} \\ A_{2,1} & A_{2,2} \end{pmatrix} + \det \begin{pmatrix} A_{1,1} & A_{1,2} \\ A_{2,1} & A_{2,2} \end{pmatrix} + \det \begin{pmatrix} A_{1,1} & A_{1,2} \\ A_{2,1} & A_{2,2} \end{pmatrix}$$

$$E_3 = \det(A)$$

Der Satz lässt sich nun beweisen, indem man das charakteristische Polynom als eine C^{n+1} Funktion identifiziert. Dann lässt sich das charakteristische Polynom als seine Taylorreihe exakt darstellen.

$$p_A(\lambda) = \sum_{k=0}^n \frac{p_A^{(k)}(0)}{k!} \lambda^k \quad (\text{E.2})$$

Um die k -te Ableitung einer Determinante zu berechnen, wird diese mithilfe der Leibnitz-Formel explizit angeschrieben und dann mit der verallgemeinerten Leibnitz-Regel für Ableitungen von Produkten differenziert.

Verallgemeinerte Formel zur Ableitung von Produkten nach Leibnitz

$$\left(\prod_{i=1}^n f_i \right)^{(k)} = \sum_{\substack{k_1, \dots, k_n \\ k_1 + \dots + k_n = k}} \frac{k!}{k_1! \dots k_n!} \left(\prod_{i=1}^n f_i^{(k_i)} \right) \quad (\text{E.3})$$

$$\begin{aligned} \frac{d^k \det(M(\lambda))}{d\lambda^k} &= \frac{d^k}{d\lambda^k} \sum_{P \in S_n} \text{sign}(P) \prod_{i=1}^n M_{i,P(i)}(\lambda) \\ &= \sum_{P \in S_n} \text{sign}(P) \frac{d^k}{d\lambda^k} \left(\prod_{i=1}^n M_{i,P(i)} \right) \\ &= \sum_{P \in S_n} \text{sign}(P) \sum_{\substack{k_1, \dots, k_n \\ k_1 + \dots + k_n = k}} \frac{k!}{k_1! \dots k_n!} \left(\prod_{i=1}^n \frac{d^{k_i}}{d\lambda^{k_i}} M_{i,P(i)}(\lambda) \right) \\ &= \sum_{\substack{k_1, \dots, k_n \\ k_1 + \dots + k_n = k}} \frac{k!}{k_1! \dots k_n!} \sum_{P \in S_n} \text{sign}(P) \left(\prod_{i=1}^n \frac{d^{k_i}}{d\lambda^{k_i}} M_{i,P(i)}(\lambda) \right) \end{aligned}$$

$$\frac{d^k \det(M(\lambda))}{d\lambda^k} = \sum_{\substack{k_1, \dots, k_n \\ k_1 + \dots + k_n = k}} \frac{k!}{k_1! \dots k_n!} \det \begin{pmatrix} \frac{d^{k_1}}{d\lambda^{k_1}} M_{1,1}(\lambda) & \dots & \frac{d^{k_1}}{d\lambda^{k_1}} M_{1,n}(\lambda) \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \frac{d^{k_n}}{d\lambda^{k_n}} M_{1,1}(\lambda) & \dots & \frac{d^{k_n}}{d\lambda^{k_n}} M_{n,n}(\lambda) \end{pmatrix} \quad (\text{E.4})$$

Da für das charakteristische Polynom von $M(\lambda) = A - \lambda$ gilt $\frac{d}{d\lambda} M_{i,i}(\lambda) = -1$ und $\frac{d}{d\lambda} M_{i,j}(\lambda) = 0$ falls $i \neq j$. Daher wird in (E.4) aus einer Zeile mit Index i eine Nullzeile falls $k_i \geq 2$ gilt. Die Determinante einer Matrix mit Nullzeile ist jedoch null, sodass in (E.4) nur die Terme übrig bleiben, bei denen $k_i \in \{0, 1\}$ gilt.

$$\frac{d^k \det(M(\lambda))}{d\lambda^k} = k! \sum_{\substack{k_1, \dots, k_n \in \{0,1\} \\ k_1 + \dots + k_n = k}} \det \begin{pmatrix} \frac{d^{k_1}}{d\lambda^{k_1}} M_{1,1}(\lambda) & \dots & \frac{d^{k_1}}{d\lambda^{k_1}} M_{1,n}(\lambda) \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \frac{d^{k_n}}{d\lambda^{k_n}} M_{1,1}(\lambda) & \dots & \frac{d^{k_n}}{d\lambda^{k_n}} M_{n,n}(\lambda) \end{pmatrix}$$

Gilt $k_i = 0$ so ändert sich die Zeile nicht. Für $k_i = 1$ wird die i -te Zeile der Matrix durch den Einheitsvektor $-e_i$ getauscht. Die Laplace-Entwicklung der Determinante nach diesen Zeilen gibt dann $(-1)^k$ mal die Matrix die man durch Streichen der Zeilen und Spalten erhält für die $k_i = 1$ gilt. Durch das Streichen erhält man dann aber genau die Hauptminoren der Matrix.

$$\frac{d^k \det(M(\lambda))}{d\lambda^k} = k! (-1)^k \sum_{\mathcal{J} \subseteq \{1, \dots, n\}}^{\#\mathcal{J}=n-k} \det(M_{\mathcal{J}}) = k! (-1)^k \sum_{\mathcal{J} \subseteq \{1, \dots, n\}}^{\#\mathcal{J}=n-k} \det((A - \lambda)_{\mathcal{J}})$$

Durch Auswerten bei $\lambda = 0$ ergeben sich dann die Hauptminoren der Matrix A .

$$p_A^{(k)}(0) = \left. \frac{d^k \det(A - \lambda)}{d\lambda^k} \right|_{\lambda=0} = k! (-1)^k \sum_{\mathcal{J} \subseteq \{1, \dots, n\}}^{\#\mathcal{J}=n-k} \det(A_{\mathcal{J}}) = k! (-1)^k E_{n-k} \quad (\text{E.5})$$

Für $k = n$ ergibt sich für $p_A^{(k)}(0)$ der höchste Koeffizient des charakteristischen Polynoms, also $p_A^{(n)}(0) = 1$. Durch einsetzen von (E.5) in die Taylorreihe (E.2), ergibt sich dann der nachzuweisende Zusammenhang.

$$p_A(\lambda) = \sum_{k=0}^n \frac{p_A^{(k)}(0)}{k!} \lambda^k = (-1)^n \lambda + \sum_{k=0}^{n-1} (-1)^k E_{n-k} \lambda^k$$

F. Appendix: Nachtrag der verschobenen Rechnungen aus Kapitel 6

Zuerst gilt es die Aussage (6.37) beziehungsweise (F.1) zu beweisen:

$$e^{2i\delta^*} \stackrel{!}{=} \frac{\tilde{f}^2}{\Omega^2 - \kappa^2} \quad (\text{F.1})$$

Zuerst soll der linke Term der Gleichung umgeformt werden.

$$\begin{aligned} e^{2i\delta^*} &= \frac{(1 - tt^* e^{i\omega})(t - t^* e^{-i\omega})}{(1 - tt^* e^{-i\omega})(t - t^* e^{i\omega})} \\ &= \frac{(1 - tt^* e^{i\omega})^2 (t - t^* e^{-i\omega})^2}{(1 - tt^* e^{-i\omega})(1 - tt^* e^{i\omega})(t - t^* e^{i\omega})(t - t^* e^{-i\omega})} \\ &= \frac{(1 - tt^* e^{i\omega})^2 (t - t^* e^{-i\omega})^2}{(1 - tt^*(e^{-i\omega} + e^{i\omega}) + (tt^*)^2)(t^2 - tt^*(e^{i\omega} + e^{-i\omega}) + (t^*)^2)} \\ &= \frac{(1 - tt^* e^{i\omega})^2 (t - t^* e^{-i\omega})^2}{(1 + (tt^*)^2 - 2tt^* \cos(i\omega))(t^2 + (t^*)^2 - 2tt^* \cos(i\omega))} \\ &= \frac{(1 - tt^* e^{i\omega})^2 (t - t^* e^{-i\omega})^2}{(1 + (tt^*)^2)(t^2 + (t^*)^2) - 2tt^*(1 + (tt^*)^2 + (t^*)^2 + t^2) \cos(i\omega) + 4(tt^*)^2 \cos(i\omega)^2} \end{aligned}$$

Als nächstes müssen die Ausdrücke auf der Rechten Seite derart umgeformt werden, sodass die Variable

$$t^* = \frac{(1 - t)}{(1 + t)}$$

darin identifiziert werden kann. Für den Zähler erhält man dann

$$\begin{aligned} \tilde{f}(\omega) &= 2t(1 + t^2) - t^2(1 - t^2)e^{i\omega} - (1 - t^2)e^{-i\omega} \\ &= (t(1 + t) - (1 - t)e^{-i\omega})((1 + t) + t(t - 1)e^{i\omega}) \\ &= (t - t^* e^{-i\omega})(1 - tt^* e^{i\omega})(1 + t)^2 \end{aligned}$$

und für den Nenner ergibt sich

$$\begin{aligned} \Omega^2 - \kappa^2 &= ((1 + t^2)^2 - \kappa \cos(k_1))^2 - \kappa^2 \\ &= ((1 + t^2)^4 - \kappa^2 - 2(1 + t^2)^2 \kappa \cos(k_1) + \kappa^2 \cos(k_1)^2) \end{aligned}$$

und durch Rückeinsetzen für κ erhält man

$$\begin{aligned} \kappa^2 &= (2t(1 - t^2))^2 \\ &= 4t^2(1 - t^2)^2(1 + t)^2 = 4(tt^*)^2(1 + t)^4 \end{aligned}$$

beziehungsweise

$$\begin{aligned} 2(1 + t^2)^2 \kappa &= 2(1 + t^2)^2 2t(1 - t^2) \\ &= 4t(1 + t^2)(1 - t)(1 + t)^2(1 + t^2) \\ &= 4t(1 + t^2)(t^*)^2(1 + t^2)(1 + t)^2 \\ &= 2tt^*(1 + t^2)(1 + (t^*)^2)(1 + t)^4 \end{aligned}$$

Mit dem letzten Schritt

$$\begin{aligned}
(1 + t^2)^4 - \kappa^2 &= (1 + t^2)^4 - (2t(1 - t^2))^2 \\
&= 1 + 14t^4 + t^8 \\
&= (1 + (tt^*)^2)(t^2 + (t^*)^2)(1 + t)^4
\end{aligned}$$

ergibt sich die Aussage (F.1) dann durch Vergleichen der Terme.

Schließlich soll noch die Aussage (6.37) beziehungsweise (F.2) bewiesen werden:

$$\ln \left(\left(\frac{(1 - (tt^*)^2)(1 - \frac{(t^*)^2}{t^2})}{(1 - (t^*)^2)^2} \right)^{\frac{1}{4}} \right) \stackrel{!}{=} \frac{1}{4} \ln \left(1 - \frac{(1 - t^2)^4}{16t^4} \right) \quad (\text{F.2})$$

Um dies einzusehen benötigt man zuerst die folgenden Teilschritte

$$\begin{aligned}
1 - \frac{(t^*)^2}{t^2} &= \frac{1}{t^2(1 + t)^2} (t^2(1 + t)^2 - (1 - t)^2) \\
1 - (tt^*)^2 &= \frac{1}{(1 + t)^2} ((1 + t)^2 - t^2(1 - t)^2) \\
(1 - (t^*)^2)^2 &= \frac{16t^2}{(1 + t)^4}
\end{aligned}$$

Mit dem Zwischenschritt

$$(t^2(1 + t)^2 - (1 - t)^2)((1 + t)^2 - t^2(1 - t)^2) = 16t^4 - (1 - t^2)^4$$

folgt dann die zu beweisende Gleichung

$$\ln \left(\left(\frac{(1 - (tt^*)^2)(1 - \frac{(t^*)^2}{t^2})}{(1 - (t^*)^2)^2} \right)^{\frac{1}{4}} \right) = \frac{1}{4} \ln \left(\frac{16t^4 - (1 - t^2)^4}{16t^4} \right) = \frac{1}{4} \ln \left(1 - \frac{(1 - t^2)^4}{16t^4} \right).$$

Literatur

- [1] Phasenübergänge, S. 275–399. Springer Berlin Heidelberg, Berlin, Heidelberg, 2007.
doi:10.1007/978-3-540-68871-6_4
- [2] E. W. MONTROLL, R. B. POTTS, J. C. WARD. *Correlations and Spontaneous Magnetization of the Two-Dimensional Ising Model*. Journal of Mathematical Physics **4** (1963) 308.
doi:10.1063/1.1703955
- [3] S. SAMUEL. *The use of anticommuting variable integrals in statistical mechanics. I. The computation of partition functions*. Journal of Mathematical Physics **21** (1980) 2806.
doi:10.1063/1.524404
- [4] S. SAMUEL. *The use of anticommuting variable integrals in statistical mechanics. II. The computation of correlation functions*. Journal of Mathematical Physics **21** (1980) 2815.
doi:10.1063/1.524405
- [5] R. GROSS, A. MARX. *Festkörperphysik*, S. 110–113. Oldenbourg Wissenschaftsverlag, 2014.
- [6] *Quantenstatistik*, S. 99–166. Springer Berlin Heidelberg, Berlin, Heidelberg, 2007.
doi:10.1007/978-3-540-68871-6_2
- [7] A. MARTIN-LÖF. *On the Spontaneous Magnetization in the Ising Model*. Comm. Math. Phys. **24** (1969) 253.
- [8] J. W. NEGELE, H. ORLAND. *Quantum many-particle systems*. Advanced books classics. Westview Press, [Boulder, Colo.], 1998. Description based upon print version of record.
- [9] P. VARILLY. *Grassmann Numbers in Quantum Mechanics*. MIT Undergraduate Journal of Mathematics **8** (2006) 97.
- [10] J. ZINN-JUSTIN. An introduction to Quantum Field Theory I - Lecture 10: Fermions in the grassmann formalism. Vorlesungsskript, 2016. URL = <http://irfu.cea.fr/Phoceae/Page/index.php?id=678>.
- [11] H. E. HABER. Notes on antisymmetric matrices and the pfaffian, 2009 .
- [12] B. SILBERMANN. *THE STRONG SZEGÖ LIMIT THEOREM FOR A CLASS OF SINGULAR GENERATING FUNCTIONS, I*. Demonstratio Mathematica **14** (1981) 647 .
doi:<https://doi.org/10.1515/dema-1981-0311>
- [13] M. POST. Lösung des zweidimensionalen Ising-Modells mittels Graßmann-Variablen und der Renormierungsgruppe. Bachelorarbeit, 2014. Westfälische Wilhelms-Universität Münster.

- [14] V. GANDHI. Exact solution of the 2D Ising model via Grassmann variables, 2018.
Accessed: 22.09.2020.
[https://gandhiviswanathan.wordpress.com/2018/10/31/
exact-solution-of-the-2d-ising-model-via-grassmann-variables/](https://gandhiviswanathan.wordpress.com/2018/10/31/exact-solution-of-the-2d-ising-model-via-grassmann-variables/)
- [15] F. J. WEGNER. Duality in generalized Ising models, 2014.
- [16] F. QUIRING, G. FISCHER. *Lernbuch Lineare Algebra und Analytische Geometrie: Das Wichtigste ausführlich für das Lehramts- und Bachelorstudium*. Springer Fachmedien Wiesbaden, 2017.
- [17] R. A. HORN, C. R. JOHNSON. *Topics in Matrix Analysis*. Cambridge University Press, 1991.
doi:10.1017/CBO9780511840371