Graßmann-Variable

Franz Wegner
Institut für Theoretische Physik
Universität Heidelberg

1 Einführung

Die vorliegende Ausarbeitung über Graßmann-Variable und Anwendungen in der Physik beruht auf unveröffentlichten Aufzeichnungen und Untersuchungen des Autors aus dem Jahre 1984, aus einem Seminar über Graßmann-Variable mit H. G. Dosch im Winter-Semester 1983/84, einer Vorlesung über Graßmann-Variable im Winter-Semester 1994/95 und wurde angefertigt für einen Kurs im Rahmen der "Heidelberger Graduiertenkurse Physik" im Oktober 1998. Dieser Kurs soll vor allem ein einführender Kurs sein, also keine Vorkenntnisse in Graßmann-Variablen erfordern. Im Rahmen der beschränkten Zeit ist es nicht möglich alles Interessante zu bringen. Wir werden die Algebra und Integrale über Graßmann-Variable einführen und auswerten, einige Anwendungen bringen und bis zur Superspur und der Superdeterminante gelangen. Alles, was (streng) mit dem konjugiert Komplexen und dem Adjungierten zu tun hat, kann in der Kürze der Zeit nicht gebracht werden. Es ist beabsichtigt, die Ausarbeitung fortzusetzen und diese Teile später hinzuzufügen.

Wofür sind Graßmann-Variable gut und was sollen sie leisten? In der Quantenmechanik führt man zur Beschreibung von Vielteilchensystemen Teilchenerzeugungs- und Vernichtungs-Operatoren ein, wobei sich die Eigenschaften dieser Operatoren für Bosonen und Fermionen wesentlich unterscheiden. Die Bosonen-Erzeuger kommutieren untereinander wie auch die Bosonenvernichter untereinander. Sie stimmen soweit mit den Eigenschaften von komplexen Zahlen überein. Fermionen-Erzeuger antikommutieren untereinander, desgleichen Fermionen-Vernichter. Dies ist genau die Eigenschaft von Graßmann-Variablen. Die Pfadintegral-Darstellung von Bosonen wird durch komplexe Felder geleistet. An ihre Stelle treten bei Fermionen Graßmann-wertige Felder. Dies wird eine Anwendung von Graßmann-Variablen sein.

Graßmann[1] führte die Variablen nicht für die Quantenmechanik ein. Sein Ausgangspunkt war ein geometrischer. Das vektorielle Produkt zweier Vektoren ist antikommutativ[2]

$$\vec{a} \times \vec{b} = -\vec{b} \times \vec{a} \tag{1.1}$$

Dies verallgemeinerte Graßmann auf höhere Dimensionen. Zugleich führte er noch eine Operation ein, die das Produkt aus n Vektoren in d Dimensionen mit einem aus $d-n$ Vektoren verknüpfte. Damit wollen wir uns hier jedoch nicht befassen.

Neben der Einführung von Graßmann-Variablen zur Behandlung von Fermionen in Pfadintegralen können diese auch zur Lösung von Dimer-Problemen und der Lösung des Ising-Modells in zwei Dimensionen eingesetzt werden. In all diesen Fällen wird über Graßmann-Variable integriert. Die Endergebnisse enthalten dann natürlich keine Graßmann-Variable mehr.

[1] Hermann Günther Graßmann, 1809-1877, Gymnasiallehrer, Forschungen auf dem Gebiet der Mathematik (Graßmann-Variable und Graßmann-Mannigfaltigkeiten) und der Sprachwissenschaften (Graßmannsches Aspiratengesetz, Übersetzung der Rig-Veda aus dem Sanskrit mit Erstellung eines Wörterbuchs), 1876 Ehrendoktor der Universität Tübingen "der, was in dieser Zeit selten ist, beispielhafte Kenntnisse der Mathematik mit denen der Sprachwissenschaften verbindet und in beiden Wissenschaften als glänzendster Autor herausragt, am meisten sich durch seine scharfsinnige Übersetzung der Rig-Veda-Hymnen den berühmtesten Namen gemacht hat."

[2] Graßmann " auch machte mich das merkwürdige Resultat anfangs betroffen, dass für diese neue Art des Produktes zwar die übrigen Gesetze der gewöhnlichen Multiplikation und namentlich ihre Beziehung zur Addition bestehen blieb, dass man aber die Faktoren nur vertauschen konnte, wenn man zugleich die Vorzeichen umkehrte"

Dabei fällt auf, dass Graßmann-Variable häufig ein inverses Verhalten zu dem komplexer Zahlen zeigen. Dies lässt sich beim Problem der Anderson-Lokalisierung, das heißt beim Verhalten eines Teilchens in einem Zufallspotential verwenden. Hier lässt sich nämlich das Inverse einer Zustandssumme durch Graßmann-Variable darstellen, was die exakte Mittelung über die Unordnung ermöglicht. Dabei treten Symmetrien auf, die komplexe und Graßmann-wertige Komponenten ineinander transformieren, Symmetrien, die man auch als Supersymmetrien bezeichnet. Im engeren Sinne steht der Begriff Supersymmetrie auch für eine postulierte Symmetrie zwischen Bosonen und Fermionen.

In den letzten Jahrzehnten haben sich die Bezeichnungen Super-Algebra, Super-Matrix etc. eingebürgert. Daneben gibt es auch die weniger marktschreierischen Bezeichnungen graduierte Algebra, graduierte Matrix etc. (engl. graded), die sich vielleicht wieder durchsetzen.

2 Algebra

Eine Einführung in die Analysis der Graßmann-Variablen findet man in [1], eine Kurzfassung befindet sich auch in [2] Abschn. 1.6-1.9.

2.1 Elemente der Algebra, Addition, Multiplikation

Gegeben sei eine Basis von r Vektoren ζ_i, $i = 1, ...r$. Diese Basis werde erweitert durch die Einführung des Produktes der Vektoren ζ_i. Dieses Produkt genüge dem Assoziativgesetz und dem Antikommutativgesetz. Aus letzterem folgt $\zeta_i^2 = 0$. Einschließlich des leeren Produktes erhält man 2^r Basiselemente

$$\begin{array}{ll} 1 & \\ \zeta_i & i = 1..r \\ \zeta_i\zeta_j = -\zeta_j\zeta_i & i < j \\ ... & \\ \zeta_1\zeta_2...\zeta_r. & \end{array} \tag{2.1}$$

Die Elemente der Algebra seien die Linearkombinationen dieser 2^r Basisvektoren

$$a = a^{(0)} + \sum_i a_i^{(1)}\zeta_i + \sum_{i<j} a_{ij}^{(2)}\zeta_i\zeta_j + ..., \tag{2.2}$$

wobei die Koeffizienten $a^{(m)}_{i_1 i_2 ... i_m}$ komplexe Zahlen seien.

Die Addition sei wie üblich in Vektorräumen definiert (die Koeffizienten mit gleichen Indices $m, i_1, i_2, ...i_m$ sind zu addieren). Für die Multiplikation der Monome

$$a = a^{(k)}\zeta_{i_1}\zeta_{i_2}...\zeta_{i_k}, \tag{2.3}$$

$$b = b^{(l)}\zeta_{j_1}\zeta_{j_2}...\zeta_{j_l}. \tag{2.4}$$

gelte

$$ab = a^{(k)}b^{(l)}\zeta_{i_1}\zeta_{i_2}...\zeta_{i_k}\zeta_{j_1}\zeta_{j_2}...\zeta_{j_l}. \tag{2.5}$$

Stimmt mindestens ein ζ_i mit einem ζ_j überein, so verschwindet ab. Die Multiplikation von Polynomen wie in (2.2) folgt aus der Forderung des Distributivgesetzes. Das Assoziativgesetz ist dann leicht zu beweisen.

2.2 Gerade und ungerade Elemente

Wir führen nun einen linearen Operator $\mathcal{P}$ ein, der die Graßmann-Variablen in ihr Negatives überführt,

$$\mathcal{P}(\zeta) = -\zeta. \tag{2.6}$$

Ein Monom der Ordnung k in den Graßmann-Variablen wird damit mit $(-)^k$ multipliziert. Das heißt für a aus (2.3) gilt

$$\mathcal{P}(a) = (-)^k a. \tag{2.7}$$

Ein Produkt aus einer geraden (ungeraden) Anzahl von Faktoren ζ und deren Linearkombinationen werden als gerade (ungerade) Elemente der Algebra bezeichnet. Bei Anwendung von P werden sie mit $+$, $(-)$ multipliziert. Jedes Element ist eindeutig in die Summe aus einem geraden und einem ungeraden Element zerlegbar. Für a aus (2.2) gilt

$$a = a_+ + a_-, \tag{2.8}$$

$$a_+ = a^{(0)} + \sum_{i<j} a_{ij}^{(2)}\zeta_i\zeta_j + \sum_{i<j<k<l} a_{ijkl}^{(4)}\zeta_i\zeta_j\zeta_k\zeta_l + ... \in \mathcal{A}_+, \tag{2.9}$$

$$a_- = \sum_i a_i^{(1)}\zeta_i + \sum_{i<j<k} a_{ijk}^{(3)}\zeta_i\zeta_j\zeta_k + ... \in \mathcal{A}_-. \tag{2.10}$$

Diese Einteilung in gerade und ungerade Elemente ist der Grund dafür, dass man die Graßmann-Algebra auch als graduierte Algebra bezeichnet. Es gilt

$$a_+ + b_+, a_+b_+ = b_+a_+, a_-b_- = -b_-a_- \in \mathcal{A}_+, \tag{2.11}$$

$$a_- + b_-, a_+b_- = b_-a_+, a_-b_+ = b_+a_- \in \mathcal{A}_-. \tag{2.12}$$

Im Folgenden werden wir uns meist mit Elementen a befassen, die entweder gerade oder ungerade sind. Wir beobachten, dass $a^2 = 0$ für alle $a \in \mathcal{A}_-$.

2.3 Gewöhnlicher und nilpotenter Anteil

Den Anteil $a^{(0)}$ in (2.2) bezeichnet man als den gewöhnlichen Anteil von a, den Rest als den nilpotenten Anteil

$$\mathrm{ord}(a) = a^{(0)}, \tag{2.13}$$

$$\mathrm{nil}(a) = a - a^{(0)}, \tag{2.14}$$

da man unmittelbar sieht, dass $(\mathrm{nil}(a))^{r+1} = 0$, wobei r die Dimension des von den ζ_i aufgespannten Vektorraumes ist. Bei genauerer Betrachtung findet man, dass bereits $(\mathrm{nil}(a))^p = 0$ für $2p > r + 1$. Ist f eine hinreichend oft differenzierbare Funktion, so ist $f(a)$ durch die Taylor-Entwicklung

$$f(a) = f(a^{(0)}) + f'(a^{(0)})\mathrm{nil}(a) + \frac{1}{2}f"(a^{(0)})(\mathrm{nil}(a))^2 + ... \tag{2.15}$$

definiert. Man erkennt daraus, dass das Inverse von a genau dann existiert, wenn $a^{(0)}$ von Null verschieden ist. Im Englischen wird der ordentliche Anteil als body, der nilpotente als soul bezeichnet.

Aufgaben

(2.1) Berechne $(\xi_1\xi_2 + \xi_3\xi_4)^2$ mit $\xi_i \in \mathcal{A}_-$.

(2.2) Wie lauten die Lösungen x von $x^2 = 1 + \alpha\beta$ mit $\alpha, \beta \in \mathcal{A}_-$. Hat $x^2 = \alpha\beta$ eine Lösung?

3 Ableitung, Integration

3.1 Ableitung

Eine von $\zeta \in \mathcal{A}_-$ abhängige Funktion f ist linear in ζ,

$$f(\zeta) = f(0) + \zeta f_l = f(0) + f_r \zeta, \quad f_r = \mathcal{P}(f_l), \tag{3.1}$$

wobei $f(0)$, f_r und f_l von ζ unabhängig sind. Die linksseitige und rechtsseitige Ableitung sind definiert als

$$\frac{d}{d\zeta} f = f_l, \quad df/d\zeta = f_r. \tag{3.2}$$

Im Folgenden wird im Wesentlichen die Rechtsableitung verwendet. Es sei jedoch darauf hingewiesen, dass man genau so mit der Linksableitung arbeiten kann, wobei sich die Ergebnisse gemäß (3.1) im Vorzeichen unterscheiden können. Dann ist es auch sinnvoll, das Differential unter dem Integral in (3.9) links der Funktion zu schreiben. Bei Verwendung der Literatur überzeuge man sich von der jeweiligen (Vorzeichen-)Konvention. Es gilt die Produktregel

$$d(fg)/d\zeta = df/d\zeta \mathcal{P}(g) + f dg/d\zeta. \tag{3.3}$$

Für eine Funktion, die von mehreren $\zeta \in \mathcal{A}_-$ abhängt, gilt, dass die Ableitungen antikommutieren

$$\partial^2 f/\partial\zeta_k \partial\zeta_l = -\partial^2 f/\partial\zeta_l \partial\zeta_k. \tag{3.4}$$

Die Ableitung einer Funktion $f(z,\zeta)$ nach einer Variablen $z \in \mathcal{A}_+$ bestimmt man, indem man die Komponenten bezüglich der Produkte der ζs nach z ableitet.

$$\frac{\partial f(z,\zeta)}{\partial z} = \frac{\partial(f_0(z) + f_1(z)\zeta)}{\partial z} = \frac{df_0(z)}{dz} + \frac{df_1(z)}{dz}\zeta. \tag{3.5}$$

Es gibt keine Unterscheidung zwischen rechtsseitiger und linksseitiger Ableitung für gerade Variable

$$\frac{d}{dz} f = df/dz \tag{3.6}$$

und die übliche Produktregel gilt

$$d(fg)/dz = df/dz g + f dg/dz. \tag{3.7}$$

Die Ableitungen nach $\zeta \in \mathcal{A}_-$ kommutieren mit denen nach $z \in \mathcal{A}_+$,

$$\partial^2 f/\partial z \partial\zeta = \partial^2 f/\partial\zeta \partial z. \tag{3.8}$$

3.2 Integral

Für das "bestimmte Integral" über antikommutierende Variable fordert man Translationsinvarianz

$$\int f(\xi) d\xi = \int f(\xi + \alpha) d\xi \text{ mit } \xi, \alpha \in \mathcal{A}_- \tag{3.9}$$

in Analogie zu

$$\int_{-\infty}^{\infty} f(x) dx = \int_{-\infty}^{\infty} f(x+a) dx \text{ mit } x, a \in \mathcal{A}_+. \tag{3.10}$$

Aus (3.9) folgt mit $f(\xi) = \xi$

$$\int \alpha d\xi = 0. \tag{3.11}$$

Man setzt daher

$$\int d\xi = 0, \quad \int \xi d\xi = 1, \tag{3.12}$$

wobei letztes Integral willkürlich auf 1 normiert wurde. Daher stimmt die Integration mit der rechtsseitigen Differentiation überein,

$$\int f(\xi)d\xi = df(\xi)/d\xi. \tag{3.13}$$

Daraus folgt, da $df(\xi)/d\xi$ unabhängig von ξ ist,

$$\int (df(\xi)/d\xi)d\xi = 0, \tag{3.14}$$

was analog auch für eine Funktion $f(x)$ gilt, wenn $f(x \to \infty) = f(x \to -\infty) = 0$,

$$\int_{-\infty}^{\infty} (df(x)/dx)dx = 0. \tag{3.15}$$

Mit (3.3) folgt dann für die partielle Integration

$$\int f(\xi)(dg(\xi)/d\xi)d\xi = -\int (df(\xi)/d\xi)\mathcal{P}(g(\xi))d\xi. \tag{3.16}$$

Da die Ableitungen antikommutieren, gilt dies auch für die Differentiale

$$d\xi_l d\xi_k = -d\xi_k d\xi_l. \tag{3.17}$$

3.3 Gauß-Integrale I

In den Anwendungen der Graßmann-Variable haben Gauß-Integrale eine wichtige Rolle. Wir betrachten zunächst das Integral über die $2r$ Graßmann-Variable $\xi_1, ...\xi_r$, $\eta_1, ...\eta_r$

$$I_- = \int \exp(\sum_{k,l=1}^{r,r} \xi_k a_{kl} \eta_l) \prod_{k=1}^{r} (d\eta_k d\xi_k), \tag{3.18}$$

wobei die Elemente a_{kl} der Matrix a komplexe Koeffizienten sind. (Allgemeiner sind sie Elemente aus $\mathcal{A}_+$, die nicht von diesen ξ und η abhängen, über die wir integrieren.) Die Exponentialfunktion kann mit Hilfe der Taylor-Entwicklung dargestellt werden. Für $r = 1$ haben wir dann

$$\int (1 + \xi_1 a_{11} \eta_1) d\eta_1 d\xi_1 = \int \xi_1 a_{11} d\xi_1 = a_{11}. \tag{3.19}$$

Für größere r gehen wir rekursiv vor, indem wir erst nach η_1 ableiten

$$I_- = \int \sum_{m=1}^{r} \exp(\sum_{k=1,l=2}^{r,r} \xi_k a_{kl} \eta_l) a_{m1} \xi_m d\xi_1 \prod_{k=2}^{r} (d\eta_k d\xi_k). \tag{3.20}$$

Als nächstes bietet sich die Integration nach ξ_m an,

$$I_- = \sum_{m=1}^{r} (-)^{m-1} a_{m1} \int \exp(\sum_{k\neq m, l\neq 1} \xi_k a_{kl} \eta_l) \prod_{k=1}^{m-1} (d\eta_{k+1} d\xi_k) \prod_{k=m+1}^{r} (d\eta_k d\xi_k). \tag{3.21}$$

Dabei rührt der Faktor $(-)^{m-1}$ von der Umstellung der Differentiale $d\xi$ und $d\eta$ her, denn für $k = 1, ...m-1$ wurde $d\xi_k d\eta_{k+1} d\xi_m = -d\xi_m d\eta_{k+1} d\xi_k$ angewendet, um $d\xi_m$ als erstes Differential zu haben. Aus (3.21) sehen wir, dass sich das Integral I der $r \times r$ Matrix a als Summe aus r Termen schreiben lässt, die die Form $(-)^{m-1} a_{m1}$ mal einem Integral der gleichen Form abhängig nun von der $(r-1) \times (r-1)$ Matrix, die man aus a durch Streichen der m-ten Zeile und 1. Spalte erhält. Dies ist genau die Rekursions-Formel für Determinanten. Da das Integral für $r = 1$, (3.19), gerade die Determinante der 1×1 Matrix ist, folgt

$$I_- = \int \exp(\sum_{k,l=1}^{r,r} \xi_k a_{kl} \eta_l) \prod_{k=1}^{r} (d\eta_k d\xi_k) = det(a). \tag{3.22}$$

Entsprechend gilt durch Umdrehen des Vorzeichens von a und Vertauschen der Reihenfolge der $d\eta$ und $d\xi$

$$\int \exp(-\sum_{k,l=1}^{r,r} \xi_k a_{kl} \eta_l) \prod_{k=1}^{r} (d\xi_k d\eta_k) = det(a). \tag{3.23}$$

Für die Exponentialfunktion komplexer Zahlen $x \in \mathcal{A}_+$ erhält man dagegen

$$I_+ = \int \exp(-\sum_{k,l=1}^{r,r} x_k^* a_{kl} x_l) \prod_{k=1}^{r} d\Re x_k d\Im x_k = \pi^r / det(a). \tag{3.24}$$

x^* bezeichnet das konjugiert Komplexe von x. Das Integral ist bezüglich des Real- und des Imaginärteils der x_k jeweils von $-\infty$ bis $+\infty$ zu erstrecken. Es existiert, falls der Realteil aller Eigenwerte von a positiv ist. Statt $d\Re x d\Im x$ hätten wir auch $dx^* dx$ schreiben können und einen zusätzlichen Faktor $-2i$ wegen $dx^* dx = -2id\Re x d\Im x$ erhalten. Bei der Integration mit komplexen Zahlen muss man das konjugiert Komplexe verwenden. Man kann so etwas auch für Graßmann-Variable machen, ist dazu aber nicht gezwungen. Der wesentliche Unterschied zwischen dem Gauß-Integral über Graßmann-Variable und über komplexe Variable liegt darin, dass man einmal die Determinante, das andere Mal ihr Inverses erhält. Hier zeigt sich, dass man für Graßmann-Variable häufig das Inverse im Vergleich zu komplexen Variablen erhält.

Wir wollen nun im Exponenten noch lineare Terme hinzufügen mit $u, v \in \mathcal{A}_+$

$$\begin{aligned} I_+ &= \int \exp(-\sum_{k,l=1}^{r,r} x_k^* a_{kl} x_l + \sum_k (u_k^* x_k + x_k^* v_k)) \prod_{k=1}^{r} d\Re x_k d\Im x_k \\ &= \int \exp(-(x^{t*} - u^{t*} a^{-1}) a (x - a^{-1} v) + u^{t*} a^{-1} v) \prod_{k=1}^{r} d\Re x_k d\Im x_k \\ &= \frac{\pi^r}{det(a)} \exp(u^{t*} a^{-1} v). \end{aligned} \tag{3.25}$$

Hierbei haben wir x als Spaltenvektor eingeführt. x^{*t} ist der hermitesch adjungierte (Zeilen-)Vektor. Mit ^{t} bezeichnen wir die Transposition. Beachtet man nun noch, dass

$$\left.\frac{\partial^2 I_+}{\partial u_q^* \partial v_p}\right|_{u=v=0} = \int x_p^* x_q \exp(-\sum_{k,l=1}^{r,r} x_k^* a_{kl} x_l) \prod_{k=1}^{r} d\Re x_k d\Im x_k = (a^{-1})_{q,p} \frac{\pi^r}{det(a)}, \tag{3.26}$$

so sehen wir, dass das Inverse der Matrix a mit dem Integral über $x_q x_p^*$ multipliziert mit der Gauß-Funktion verknüpft ist. Ähnlich findet man für I_- mit $\alpha, \beta \in \mathcal{A}_-$

$$\begin{aligned} I_- &= \int \exp(-\sum_{k,l=1}^{r,r} \xi_k a_{kl} \eta_l + \sum_k (\xi_k \alpha_k + \beta_k \eta_k)) \prod_{k=1}^{r} (d\xi_k d\eta_k) \\ &= \int \exp(-(\xi^t - \beta^t a^{-1}) a (\eta - a^{-1} \alpha) + \beta^t a^{-1} \alpha) \prod_{k=1}^{r} (d\xi_k d\eta_k) \\ &= det(a) \exp(\beta^t a^{-1} \alpha). \end{aligned} \tag{3.27}$$

und

$$\partial^2 I_- / (\partial \alpha_p \partial \beta_q)\big|_{\alpha=\beta=0} = \int \eta_q \xi_p \exp(-\sum_{k,l=1}^{r,r} \xi_k a_{kl} \eta_l) \prod_{k=1}^{r} (d\xi_k d\eta_k) = (a^{-1})_{q,p} det(a), \tag{3.28}$$

so dass auch hier das Inverse von a durch ein Integral über $\eta_q \xi_p$ multipliziert mit der Gauß-Funktion ausgedrückt wird.

3.4 Quantenmechanisches Teilchen im Zufallspotential

Betrachtet man quantenmechanische Teilchen im Zufallspotential, etwa beschrieben durch einen Tight-binding Hamilton-Operator

$$H = \sum_{r,r'} |r\rangle f_{r,r'} \langle r'|, \tag{3.29}$$

wobei die kets $|r\rangle$ für die Wellenfunktionen der Orbitale stehen, die mit r durchnumeriert sind. (r kann beispielsweise der Gitterplatz des Atoms sein, dessen Orbital betrachtet wird. Es können auch noch andere Quantenzahlen eingehen). Man ist dann an den Green-Funktionen

$$G(r,r',z) = \langle r|\frac{1}{z-H}|r'\rangle \tag{3.30}$$

interessiert. beispielsweise ist

$$\rho(r,E) = \lim_{\eta\to 0}(G(r,r,E-i\eta) - G(r,r,E+i\eta))/(2\pi i) \tag{3.31}$$

die Zustandsdichte des Orbitals r. Wir können diese Größe ausdrücken durch (3.26) oder (3.28).

$$\begin{aligned} G(r,r',z) &= s\det(s(z-f)) \int x_r x^*_{r'} \exp(-\sum_{r,r'} x^*_r s(z\delta_{r,r'} - f_{r,r'})x_{r'}) \prod_r (d\Re x_r d\Im x_r/\pi) \\ &= s\det(s(z-f))^{-1} \int \eta_r \xi_{r'} \exp(-\sum_{r,r'} \xi_r s(z\delta_{r,r'} - f_{r,r'})\eta_{r'}) \prod_r (d\xi_r d\eta_r). \end{aligned} \tag{3.32}$$

Dabei wird der Faktor s so gewählt, dass das Integral konvergiert. Da f hermitesch ist, wählen wir s nach dem Vorzeichen des Imaginärteils von z, $s = -i\,\mathrm{sign}\Im z$. Das Potential soll ein Zufallspotential sein. Das heißt, man gibt sich eine Verteilung der Matrixelemente von f vor, über die zu mitteln ist. Dabei sind die Determinanten $\det(f)$ sehr störend. Man kann dies umgehen, indem man sowohl das Integral über die komplexen als auch über die Graßmann-wertigen Variablen durchführt

$$\begin{aligned} G(r,r',z) &= s\int \left\{ \begin{array}{c} x_r x^*_{r'} \\ \eta_r \xi_{r'} \end{array} \right\} \exp(-\sum_{r,r'} s(x^*_r(z\delta_{r,r'} - f_{r,r'})x_{r'} + \xi_r(z\delta_{r,r'} - f_{r,r'})\eta_{r'}) \\ &\quad \times \prod_r (d\Re x_r d\Im x_r/\pi d\xi_r d\eta_r). \end{aligned} \tag{3.33}$$

Dabei kann man wahlweise den oberen oder den unteren Ausdruck in der geschweiften Klammer verwenden. Hat man etwa eine Gauß-Verteilung für die Matrixelemente f, so kann man jetzt leicht eine Mittelung über diese vornehmen. Dies ist die Grundlage der Verfahren in [3, 4, 5].

Aufgaben

(3.1) Berechne $\int f(\xi)(\xi-\eta)d\xi$ für $\xi,\eta \in \mathcal{A}_-$. Welche Bedeutung hat demnach die Funktion $(\xi-\eta)$?

(3.2) Was ergibt das Integral $\int e^{i\alpha\xi}d\xi$ mit $\alpha,\xi \in \mathcal{A}_-$? Vergleichen Sie mit $\int_{-\infty}^{\infty} e^{iax}dx = 2\pi\delta(a)$.

(3.3) Man zeige die Produktregel Gleichung (3.3).

(3.4) Man entwickle die Exponentialfunktion in Gl. (3.18) nach den Graßmann-Variablen für $r=2$ und führe die Integration aus.

(3.5) Man überzeuge sich durch Zerlegung von $x \in \mathcal{A}_+$ in Real- und Imaginärteil, dass auch für $v \neq u$ die Beziehung $\int \exp(-(x^*-u^*)a(x-v))d\Re x d\Im x = \int \exp(-x^* a x) d\Re x d\Im x$ gilt.

4 Pfadintegrale für Fermionen

In diesem Abschnitt betrachten wir Pfadintegrale für Fermionen. Wir werden dabei auch analoge Formeln für Bosonen angeben. Allerdings werden wir die Herleitung nur für Fermionen angeben. Sie ist teilweise einfacher, da fermionische Zustände nur unbesetzt oder einfach besetzt sein können, während bosonische beliebig oft besetzt sein können. Allerdings muss man bei Fermionen mehr Mühe auf Vorzeichen verwenden. Pfadintegrale werden z.B. behandelt in [2] Abschn. 3.5 und 5.5, [6] Abschn. 9.1, [7] Kap. 7 und in [8].

Die Erzeuger und Vernichter für Bosonen werden mit $b^\dagger$ und b, die für Fermionen mit $f^\dagger$ und f bezeichnet. Es gelten die üblichen Kommutator- und Antikommutator-Relationen

$$[b_i^\dagger, b_j^\dagger] = [b_i, b_j] = 0, \quad [b_i, b_j^\dagger] = \delta_{i,j}, \tag{4.1}$$

$$\{f_i^\dagger, f_j^\dagger\} = \{f_i, f_j\} = 0, \quad \{f_i, f_j^\dagger\} = \delta_{i,j}, \tag{4.2}$$

wobei die eckigen Klammern für den Kommutator $[A, B] := AB - BA$ und die geschweiften für den Anti-Kommutator $\{A, B\} = AB + BA$ stehen.

4.1 Kohärente Zustände

Um zur Pfadintegral-Darstellung zu gelangen, führt man kohärente Zustände $|c\rangle$ und $|\gamma\rangle$ ein, wobei $c \in \mathcal{A}_+$ und $\gamma \in \mathcal{A}_-$, die definiert sind durch

$$b|c\rangle = c|c\rangle, \quad f|\gamma\rangle = \gamma|\gamma\rangle. \tag{4.3}$$

Die Zustände haben die Form

$$|c\rangle = \exp(cb^\dagger)|0\rangle, \quad |\gamma\rangle = \exp(-\gamma f^\dagger)|0\rangle = |0\rangle - \gamma f^\dagger|0\rangle = |0\rangle + f^\dagger|0\rangle\gamma. \tag{4.4}$$

Dabei ist $|0\rangle$ das Vakuum, d.h. $b|0\rangle = 0$ und $f|0\rangle = 0$. Entsprechend führen wir ein

$$\langle c^*| = \langle 0|\exp(c^* b), \quad \langle\bar\gamma| = \langle 0|\exp(-f\bar\gamma) = \langle 0| - \langle 0|f\bar\gamma = \langle 0| + \bar\gamma\langle 0|f. \tag{4.5}$$

Wir betrachten die γ und $\bar\gamma$ als antikommutierend mit f und $f^\dagger$, $f\bar\gamma = -\bar\gamma f$. Dann ergeben sich die Überlapp-Matrixelemente

$$\langle c^*|c\rangle = \exp(c^* c), \quad \langle\bar\gamma|\gamma\rangle = \langle 0|0\rangle + \langle 0|f\bar\gamma\gamma f^\dagger|0\rangle = 1 + \bar\gamma\gamma = \exp(\bar\gamma\gamma). \tag{4.6}$$

Man leitet hieraus die Identität her

$$1 = \int |c\rangle\langle c^*|\exp(-cc^*)\frac{d\Re c\, d\Im c}{\pi}, \quad 1 = \int |\gamma\rangle\langle\bar\gamma|\exp(-\bar\gamma\gamma)d\bar\gamma d\gamma \tag{4.7}$$

Nach Einsetzen und Ausintegrieren von γ und $\bar\gamma$ ergibt nämlich Letzteres

$$|0\rangle\langle 0| + f^\dagger|0\rangle\langle 0|f. \tag{4.8}$$

Für die Spur eines Operators gilt

$$\mathrm{tr}(C) = \int \langle c^*|C|c\rangle\exp(-cc^*)\frac{d\Re c\, d\Im c}{\pi}, \quad \mathrm{tr}(C) = \int \langle\bar\gamma|C|-\gamma\rangle\exp(-\bar\gamma\gamma)d\bar\gamma d\gamma. \tag{4.9}$$

Man hätte das Minuszeichen in $|-\gamma\rangle$ nicht ohne Weiteres vermutet, da man wohl den Operator C mit der Darstellung der 1 multipliziert hätte und dann unter der Spur das ket $|\gamma\rangle$ nach rechts gebracht hätte. Für Bosonen liefert das entsprechende Vorgehen auch das korrekte Ergebnis. Für Fermionen gilt das nicht. Der Grund liegt darin, dass wir $\bar\gamma$, γ, f und $f^\dagger$ als ungerade Elemente der Algebra betrachten und daher $\langle\bar\gamma|$ und $|\gamma\rangle$ als gerade Elemente und daher diese bedenkenlos unter der Spur vertauschen. Tatsächlich haben wir bei der Spur aber $\langle 0|C|0\rangle + \langle 0|fCf^\dagger|0\rangle$ zu berechnen, wobei wir f oder $f^\dagger$ zusammen mit den Vakuumzuständen unter der Spur hindurchziehen, ohne dass das

Vorzeichen zu ändern ist, obwohl f und $f^\dagger$ gewissermaßen ungerade Elemente sind. Am besten man rechnet die Gleichung für die Fermionen explizit nach.

Weiter findet man

$$\langle c^*|(b^\dagger)^k b^l|c\rangle = (c^*)^k c^l \exp(c^* c), \quad \langle\bar\gamma|(f^\dagger)^k f^l|\gamma\rangle = \bar\gamma^k\gamma^l \exp(\bar\gamma\gamma). \tag{4.10}$$

Für $k = l = 0$ haben wir das bereits oben angegeben. Für Fermionen kann man es für die drei anderen Paare (k,l) leicht nachrechnen. Damit folgt dann, dass man für jeden normal-geordneten Operator C schreiben kann

$$\langle c^*|C(b^\dagger,b)|c\rangle = \exp(c^* c)C(c^*,c), \quad \langle\bar\gamma|C(f^\dagger,f)|\gamma\rangle = \exp(\bar\gamma\gamma)C(\bar\gamma,\gamma). \tag{4.11}$$

Normal-geordnet heißt, dass die Erzeuger links von den Vernichtern stehen.

4.2 Pfadintegral-Darstellung

Damit haben wir die Vorbereitungen für die Pfadintegral-Darstellung der Zustandssumme getroffen. Die Zustandssumme Z ist definiert als

$$Z = tr\,(\exp(-\beta H)) = \lim_{n\to\infty} \mathrm{tr}\,((1-\beta H/n)^n) \tag{4.12}$$

wobei H der durch Erzeuger und Vernichter ausgedrückte normal-geordnete Hamilton-Operator ist. Diesen Ausdruck können wir durch Einschieben von Einsen (4.7) schreiben als

$$\begin{gathered}\int \langle c_n^*|1-\beta H/n|c_{n-1}\rangle\langle c_{n-1}^*|1-\beta H/n|c_{n-2}\rangle ... \\ \langle c_1^*|1-\beta H/n|c_n\rangle e^{-c_n^* c_n - c_{n-1}^* c_{n-1} - ... - c_1^* c_1} \prod_{l=1}^n \frac{d\Re c_l d\Im c_l}{\pi},\end{gathered} \tag{4.13}$$

$$\begin{gathered}\int \langle\bar\gamma_n|1-\beta H/n|\gamma_{n-1}\rangle\langle\bar\gamma_{n-1}|1-\beta H/n|\gamma_{n-2}\rangle ... \\ \langle\bar\gamma_1|1-\beta H/n|-\gamma_n\rangle e^{-\bar\gamma_n\gamma_n - \bar\gamma_{n-1}\gamma_{n-1} - ... - \bar\gamma_1\gamma_1} \prod_{l=1}^n (d\bar\gamma_l d\gamma_l).\end{gathered} \tag{4.14}$$

Wir setzen nun für die Matrixelemente ein

$$\begin{gathered}\langle c_l^*|1-\beta H(b^\dagger,b)/n|c_{l-1}\rangle = \langle c_l^*|1-\beta H(b^\dagger,b)/n|c_{l-1}\rangle \\ = (1-\beta H(c_l^*,c_{l-1})/n)e^{c_l^* c_{l-1}} = \exp(-\beta H(c_l^*,c_{l-1})/n + c_l^* c_{l-1}),\end{gathered} \tag{4.15}$$

$$\begin{gathered}\langle\bar\gamma_l|1-\beta H(f^\dagger,f)/n|\gamma_{l-1}\rangle = \langle\bar\gamma_l|1-\beta H(f^\dagger,f)/n|\gamma_{l-1}\rangle \\ = (1-\beta H(\bar\gamma_l,\gamma_{l-1})/n)e^{\bar\gamma_l\gamma_{l-1}} = \exp(-\beta H(\bar\gamma_l,\gamma_{l-1})/n + \bar\gamma_l\gamma_{l-1}).\end{gathered} \tag{4.16}$$

Eingesetzt ergibt dieser Ausdruck

$$Z = \lim_{n\to\infty} \int \exp\left(\sum_{l=1}^n (c_l^*(c_{l-1}-c_l) - \beta H(c_l^*,c_{l-1})/n)\right) \prod_{l=1}^n \frac{d\Re c_l d\Im c_l}{\pi}, \tag{4.17}$$

$$Z = \lim_{n\to\infty} \int \exp\left(\sum_{l=1}^n (\bar\gamma_l(\gamma_{l-1}-\gamma_l) - \beta H(\bar\gamma_l,\gamma_{l-1})/n)\right) \prod_{l=1}^n (d\bar\gamma_l d\gamma_l). \tag{4.18}$$

mit der Randbedingung $c_0 = c_n$, $\gamma_0 = -\gamma_n$. Wir haben hier explizit nur einen Operator b bzw. f für einen Einteilchenzustand angegeben. Tatsächlich gilt die Herleitung simultan für mehrere Einteilchenzustände. Mit $\tau = \beta l/n$ wird dieser Ausdruck im Limes $n \to \infty$

$$Z = \int \exp\left(-\int_0^\beta (c(\tau)^* dc(\tau)/d\tau + H(c^*(\tau),c(\tau)))d\tau\right) [DcDc^*], \tag{4.19}$$

$$Z = \int \exp\left(-\int_0^\beta (\bar\gamma(\tau)d\gamma(\tau)/d\tau + H(\bar\gamma(\tau),\gamma(\tau)))d\tau\right) [D\bar\gamma D\gamma] \tag{4.20}$$

geschrieben. Das ist nicht ungefährlich, da die Rücküberführung in die diskrete Form nicht eindeutig ist. Dies ist die Pfadintegral-Darstellung der Zustandssumme. Aus dem quantenmechanischen Problem im d-dimensionalen Raum ist nun ein klassisches Problem in $d+1$ Dimensionen durch hinzufügen der neuen Koordinate τ geworden.

Da man nicht nur an der Zustandssumme interessiert ist, sondern auch an Korrelationen kann man dem Hamilton-Operator noch einen Quellterm hinzufügen

$$H_Q = H(b^\dagger, b) - b^\dagger J(\tau) - J^*(\tau) b, \quad H_Q = H(f^\dagger, f) - f^\dagger \eta(\tau) - \bar{\eta}(\tau) f. \tag{4.21}$$

Die Zustandssumme wird dann eine Funktion der Funktionen $J, J^* \in \mathcal{A}_+$ bzw. $\eta, \bar{\eta} \in \mathcal{A}_-$. Dabei sind die η und $\bar{\eta}$ für verschiedene τ als unabhängig anzusehen. Die Zustandssumme schreibt man dann

$$\begin{aligned} Z &= \int T_\tau \exp\left(-\int_0^\beta (\bar{\gamma}(\tau) d\gamma(\tau)/d\tau + H(\bar{\gamma}(\tau), \gamma(\tau)) - \bar{\gamma}(\tau)\eta(\tau) - \bar{\eta}(\tau)\gamma(\tau)) d\tau\right) \prod_{l=1}^n (d\bar{\gamma}_l d\gamma_l) \\ &= \lim_{n\to\infty} \int \exp\left(\sum_{l=1}^n (\bar{\gamma}_l(\gamma_{l-1} - \gamma_l) - \beta(H(\bar{\gamma}_l, \gamma_{l-1}) - \bar{\gamma}_l \eta(\beta l/n) - \bar{\eta}(\beta l/n)\gamma_{l-1})/n)\right) [D\bar{\gamma} D\gamma]. \end{aligned} \tag{4.22}$$

Hierbei wurde der τ-Ordnungsoperator T_τ eingeführt, der alle Beiträge mit steigendem τ von rechts nach links anordnet. Explizit entspricht das dann der zweiten Zeile dieser Formel. Analoge Ausdrücke erhält man für Bosonen. Die Korrelationen erhält man dann durch Funktionalableitung nach diesen Funktionen,

$$\left.\frac{\delta Z}{\delta J(\tau)}\right|_{J=0} = \operatorname{tr}\left(\exp(-\beta H)\bar{b}(\tau)\right) = \langle \bar{b}(\tau)\rangle Z, \tag{4.23}$$

$$\left.\frac{\delta^2 Z}{\delta J(\tau)\delta J^*(\tau')}\right|_{J=0} = \begin{cases} \langle \bar{b}(\tau) b(\tau')\rangle Z & \tau > \tau' \\ \langle b(\tau')\bar{b}(\tau)\rangle Z & \tau' > \tau \end{cases} \tag{4.24}$$

$$\bar{b}(\tau) = e^{\tau H} b^\dagger e^{-\tau H}, \qquad b(\tau) = e^{\tau H} b e^{-\tau H} \tag{4.25}$$

$$\delta Z/\delta\eta(\tau)|_{\eta=\bar{\eta}=0} = \operatorname{tr}\left(\exp(-\beta H)\bar{f}(\tau)\right) = \langle \bar{f}(\tau)\rangle Z, \tag{4.26}$$

$$\delta^2 Z/\delta\eta(\tau)\delta\bar{\eta}(\tau')\big|_{\eta=\bar{\eta}=0} = \begin{cases} -\langle \bar{f}(\tau) f(\tau')\rangle Z & \tau > \tau' \\ \langle f(\tau')\bar{f}(\tau)\rangle Z & \tau' > \tau \end{cases} \tag{4.27}$$

$$\bar{f}(\tau) = e^{\tau H} f^\dagger e^{-\tau H}, \qquad f(\tau) = e^{\tau H} f e^{-\tau H} \tag{4.28}$$

Wir haben die Größen $\bar{b}(\tau)$ und $\bar{f}(\tau)$ eingeführt, da sie nicht das hermitesch Adjungierte zu $b(\tau)$ und $f(\tau)$ sind. Man beachte, dass wir die fermionischen Quellen mit Graßmann-Variablen multipliziert haben. Hätten wir komplexe Variable verwendet, so wäre bereits die zweite Ableitung nach diesen verschwunden.

Aufgaben

(4.1) Berechne für ein freies Teilchen mit Hamilton-Operator $H = (\epsilon - \mu) f^\dagger f$ bzw. $b^\dagger b$ aus (4.18) bzw. (4.17) die Zustandssumme, wobei man zweckmäßigerweise die Determinanten zunächst durch $a = 1 - \beta(\epsilon - \mu)/n$ und n ausdrückt.

(4.2) Man rechne die Formel (4.9) für die Spur nach.

5 Variablen-Substitution, Gauß-Integrale

5.1 Gauß-Integrale II, Pfaffsche Form

In einem früheren Abschnitt haben wir das Integral

$$I_- = \int \exp(\sum_{k,l=1}^{r,r} \xi_k a_{kl} \eta_l) \prod_{k=1}^{r} (d\eta_k d\xi_k) \tag{5.1}$$

über Graßmann-Variable ξ und η eingeführt. Dabei war jeweils ein Faktor ξ mit einem Faktor η multipliziert. Diese Einschränkung ist nicht notwendig. Wir betrachten daher jetzt

$$I_- = \int \exp(-\frac{1}{2} \sum_{k,l=1}^{n} \xi_k a_{k,l} \xi_l) d\xi_1 d\xi_2 ... d\xi_n, \quad a_{k,l} \in \mathcal{A}_+, \quad \xi_i \in \mathcal{A}_-, \tag{5.2}$$

wobei ohne Einschränkung der Allgemeinheit angenommen wird, dass die Matrix a antisymmetrisch ist, $a_{k,l} = -a_{l,k}$. Führen wir nun die Integration über ξ_1 durch, so folgt

$$\begin{aligned} I_- &= \int \sum_{j=2}^{n} a_{1,j} \xi_j \exp(-\frac{1}{2} \sum_{k,l \neq 1,j} \xi_k a_{k,l} \xi_l) d\xi_2 d\xi_3 ... d\xi_n \\ &= \sum_{j=2}^{n} (-)^j a_{1,j} \int \exp(-\frac{1}{2} \sum_{k,l \neq 1,j} \xi_k a_{k,l} \xi_l) d\xi_2 ... d\xi_{j-1} d\xi_{j+1} d\xi_n. \end{aligned} \tag{5.3}$$

Damit haben wir eine Rekursionsformel für I_- gefunden, die besagt, dass man dieses Integral erhält, indem man die entsprechenden Integrale nach Streichung der ersten und der j-ten Variable ausführt, das Ergebnis mit $(-)^j a_{1,j}$ multipliziert und über j summiert. Diese Rekursionsformel sieht ähnlich aus wie die für die Determinante, allerdings muss man hier nicht nur die erste Zeile und die j-te Spalte aus a streichen, sondern auch die j-te Zeile und erste Spalte. Daher ist das Ergebnis ein Polynom der Ordnung $n/2$. Man bezeichnet diese Größe als die Pfaffsche Form der Matrix a. Wir haben also

$$\mathrm{pf}(a) = \int \exp(-\frac{1}{2} \sum_{k,l=1}^{n} \xi_k a_{k,l} \xi_l) d\xi_1 d\xi_2 ... d\xi_n. \tag{5.4}$$

Sie ist nur für antisymmetrische Matrizen definiert. Man hat insbesondere

$$\begin{array}{ll} \mathrm{pf}(a) = 1 & n = 0 \\ \mathrm{pf}(a) = a_{1,2} & n = 2 \\ \mathrm{pf}(a) = a_{1,2}a_{3,4} - a_{1,3}a_{2,4} + a_{1,4}a_{2,3} & n = 4 \\ \mathrm{pf}(a) = 0 & n \text{ ungerade} \end{array} \tag{5.5}$$

Wir werden unten sehen, dass die Pfaffsche Form eng mit der Determinante verknüpft ist.

5.2 Variablen-Substitution I

Drücken wir in einem Integral über $\zeta \in \mathcal{A}_-$ diese Variable durch $\eta \in \mathcal{A}_-$ aus,

$$\zeta = \zeta(\eta) = \zeta(0) + (\partial\zeta/\partial\eta)\eta, \tag{5.6}$$

so folgt bei Integration von

$$f(\zeta) = f(0) + (\partial f/\partial\zeta)\zeta, \tag{5.7}$$

das Ergebnis

$$\int f(\zeta) d\zeta = (\partial f/\partial\zeta), \int f(\zeta) d\eta = (\partial f/\partial\zeta)(\partial\zeta/\partial\eta). \tag{5.8}$$

Daher gilt

$$\int f(\zeta)d\zeta = \int f(\zeta(\eta))(\partial\zeta/\partial\eta)^{-1}d\eta. \tag{5.9}$$

wobei wir verwenden, dass die partielle Ableitung von ζ nach η von η unabhängig ist. Man beachte, dass im Vergleich zur Variablen-Substitution von Elementen aus $\mathcal{A}_+$ hier das Inverse der Ableitung eingeht.

Ersetzen wir mehrere Variable aus $\mathcal{A}_-$, so folgt

$$\int f(\zeta_1,\zeta_2,...,\zeta_m)d\zeta_1 d\zeta_2...d\zeta_m = \int f(\zeta_1(\eta_1,...),...)\frac{1}{\det(\partial\zeta/\partial\eta)}d\eta_1 d\eta_2...d\eta_m. \tag{5.10}$$

Substituiert man nämlich der Reihe nach jede Variable einzeln

$$(\eta_1,\eta_2,...\eta_m) \to (\zeta_1,\eta_2,...\eta_m) \to ... \to (\zeta_1,\zeta_2,...\zeta_m), \tag{5.11}$$

so haben wir im Nenner Faktoren

$$D_i = \frac{\partial\zeta_i(\zeta_1,...\zeta_{i-1},\eta_i,...\eta_m)}{\partial\eta_i} = \begin{vmatrix} 1 & & & & & \\ 0 & 1 & & & 0 & \\ & & \ddots & & & \\ \partial\zeta_i/\partial\zeta_1 & & \dots & \partial\zeta_i/\partial\eta_i & \dots & \partial\zeta_i/\partial\eta_m \\ & & & & \ddots & \\ & 0 & & & 1 & 0 \\ & & & & & 1 \end{vmatrix}. \tag{5.12}$$

Das Produkt dieser Matrizen ergibt die Matrix $\partial\zeta/\partial\eta$. Auf Grund des Determinanten-Multiplikationssatzes folgt

$$D_m D_{m-1}...D_1 = \det(\partial\zeta/\partial\eta). \tag{5.13}$$

Man beachte, dass alle Matrix-Elemente aus $\mathcal{A}_+$ sind, also miteinander kommutieren.[3]

Für Determinanten gilt der Determinanten-Multiplikationssatz $\det(UV) = \det(U)\det(V)$. Etwas Entsprechendes gilt auch für die Pfaffsche Form. Hierzu substituieren wir in (5.2) $\xi_k = \sum_l j_{k,l}\eta_l$. Dann folgt aus (5.2) und (5.10)

$$\begin{aligned} \int \exp(-\frac{1}{2}\sum_{k,l}\xi_k a_{k,l}\xi_l)\prod_k d\xi_k &= \mathrm{pf}(a) \\ = \int \exp(-\frac{1}{2}\sum_{k,l}\eta_k (j^t a j)_{k,l}\eta_l)/\det(j)\prod_k d\eta_k &= \mathrm{pf}(j^t a j)/\det(j) \end{aligned} \tag{5.14}$$

folgt, woraus sich

$$\mathrm{pf}(j^t a j) = \mathrm{pf}(a)\det(j) \tag{5.15}$$

ergibt. Man beachte, dass für eine antisymmetrische Matrix a auch $j^t a j$ antisymmetrisch ist.

5.3 Gauß-Integrale III, Pfaffsche Form und Determinante

Wir können nun den Zusammenhang zwischen Pfaffscher Form und Determinante herstellen. Dazu bilden wir das Quadrat des Gauß-Integrals (5.2)

$$I_-^2 = \int \exp(-\frac{1}{2}\sum_{k,l=1}^{n}(\xi_k a_{k,l}\xi_l + \zeta_k a_{k,l}\zeta_l))d\xi_1 d\xi_2...d\xi_n d\zeta_1 d\zeta_2...d\zeta_n \tag{5.16}$$

[3]Die oben angegebene Substitutionsreihe kann singulär sein, selbst wenn $\det(\partial\zeta/\partial\eta) \neq 0$. Dann verwendet man eine infinitesimal benachbarte nichtsinguläre Transformation und führt am Schluss den Limes durch. Für die Transformation $\zeta_1 = \eta_2$, $\zeta_2 = \eta_1$ führt man z.B. $\zeta_1 = \eta_2 + c\eta_1$, $\zeta_2 = \eta_1$ ein und lässt am Schluss c gegen 0 gehen. Der Leser möge D_1 und D_2 berechnen und das Produkt betrachten.

und führen die Transformation

$$\xi_k = \frac{1}{\sqrt{2}}(\eta_k + \eta'_k), \quad \zeta_k = \frac{i}{\sqrt{2}}(\eta_k - \eta'_k) \tag{5.17}$$

Mit $\partial(\xi,\zeta)/\partial(\eta',\eta) = i$ und $\xi_k\xi_l + \zeta_k\zeta_l = \eta'_k\eta_l + \eta_k\eta'_l$ folgt

$$I_-^2 = i^{-n}(-)^{n(n-1)/2} \int \exp(-\sum_{k,l=1}^{n} \eta'_k a_{k,l}\eta_l) \prod_k^n (d\eta'_k d\eta_k) \tag{5.18}$$

Dabei rührt der Faktor $(-)^{n(n-1)/2}$ von der Umordnung der Faktoren $d\zeta$ und $d\zeta'$ her. Insgesamt ergeben die Vorfaktoren $(-i)^{n^2}$, was für gerade n gleich $+1$ ist und für ungerade n gleich $-i$. Für ungerades n verschwindet aber I_-, so dass der Faktor keine Rolle spielt. Damit bleibt für die linke Seite von (5.18) nach (5.4) $\mathrm{pf}^2(a)$ und für die rechte Seite nach (3.23) $\det(a)$. Daher gilt

$$\mathrm{pf}^2(a) = \det(a). \tag{5.19}$$

Der Leser möge sich überlegen, warum die Determinante einer antisymmetrischen Matrix verschwinden muss, wenn sie von ungerader Dimension ist.

Schließlich betrachten wir noch einmal das Integral (3.18)

$$I_- = \int \exp(\sum_{k,l=1}^{r,r} \xi_k a_{k,l}\eta_l) \prod_{k=1}^{r} (d\eta_k d\xi_k), \tag{5.20}$$

Führen wir hier die Substitution $\zeta_k = \sum_l a_{k,l}\eta_l$ durch, so erhalten wir

$$I_- = \int \exp(\sum_k^r \xi_k\zeta_k) \det(a) \prod_{k=1}^{r} (d\zeta_k d\xi_k), \tag{5.21}$$

wobei die ζ- und ξ-Integrationen jetzt trivial sind. Es bleibt nur die Determinante.

Wir haben gesehen, dass das Integral (5.4) auf die Pfaffsche Form und damit auf die Quadratwurzel der Determinante führt. Das hat sein Gegenstück im Integral über reelle Variable

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \exp(-\frac{1}{2}\sum_{k,l=1}^{r,r} x_k a_{k,l} x_l) dx_1 ... dx_r = \frac{(2\pi)^{r/2}}{\sqrt{\det(a)}}, \tag{5.22}$$

wobei die Matrix a symmetrisch zu wählen ist und die Realteile der Eigenwerte von a positiv sein müssen.

Aufgabe

(5.1) Man zeige: Die Determinante einer antisymmetrischen Matrix, deren Dimension ungerade ist, verschwindet.

(5.2) Man prüfe Gleichung (5.15) durch explizites Ausrechnen für eine 2×2-Matrix nach.

6 Das Dimer-Problem

Die Behandlung des Dimer-Problems mit Graßmann-Variablen findet man in [9, 10].

Gegeben sei ein Gitter, dessen Punkte durch Kanten verbunden seien, zum Beispiel ein quadratisches Gitter, bei dem jeweils nächste Nachbarn waagrecht und senkrecht durch eine Kante miteinander verbunden seien. Man kann nun fragen: Auf wieviele verschiedene Arten kann man die Kanten mit Dimeren belegen, so dass an jedem Gitterpunkt genau eine Kante mit einem Dimer belegt ist? Dies ist das Dimer-Problem.

Zur Lösung bieten sich die Graßmann-Variablen an. Man führt nämlich für jeden Gitterpunkt x eine Graßmann-Variable ξ_x ein und bildet die Exponentialfunktion

$$\exp(\frac{1}{2}\sum_{x,x'} b_{x,x'}\xi_x\xi_{x'}), \quad b_{x,x'} = -b_{x',x}. \tag{6.1}$$

Setzen wir $b_{x,x'} = \pm 1$, wenn zwischen x und x' eine Kante läuft, sonst $b_{x,x'} = 0$, dann erhält man nach Integration der Exponentialfunktion über alle ξ einen Beitrag ± 1 von jeder Dimer-Konfiguration. Hierbei stellt sich die Frage: Kann man die Vorzeichen der $b_{x,x'}$ so wählen, dass alle Beiträge positiv sind? Wenn das möglich ist, haben wir das Problem auf die Berechnung einer Pfaffschen Form bzw. einer Determinante reduziert. Wenn es nicht möglich ist, können wir dieses Verfahren nicht anwenden.

Für das quadratische Gitter ist das möglich. Setzen wir

$$b_{k,l;k,l+1} = -b_{k,l+1;k,l} = 1, \quad b_{k,l;k+1,l} = -b_{k+1,l;k,l} = (-)^l, \quad b = 0 \text{ sonst}, \tag{6.2}$$

dann ist die Bedingung erfüllt. Davon kann man sich auf folgende Art und Weise überzeugen: Wir vergleichen zwei beliebige Dimer-Konfigurationen, indem wir sie beide auf dem Gitter auflegen. Dann enden an jedem Gitterpunkt zwei Kanten, von jeder Konfiguration eine. Das bedeutet, dass diese Doppelkonfiguration aus geschlossenen Schleifen besteht. Auf jeder Schleife gehört abwechselnd ein Dimer zur einen und zur anderen Konfiguration. Die Punkte längs einer Schleife seien x_1, x_2, ... x_{2n}. Dann haben wir für die eine Konfiguration das Produkt

$$(b_{x_1,x_2}\xi_{x_1}\xi_{x_2})(b_{x_3,x_4}\xi_{x_3}\xi_{x_4})...(b_{x_{2n-1},x_{2n}}\xi_{x_{2n-1}}\xi_{x_{2n}}), \tag{6.3}$$

für die andere

$$(b_{x_{2n},x_1}\xi_{x_{2n}}\xi_{x_1})(b_{x_2,x_3}\xi_{x_2}\xi_{x_3})...(b_{x_{2n-2},x_{2n-1}}\xi_{x_{2n-2}}\xi_{x_{2n-1}}). \tag{6.4}$$

Bringen wir nun im zweiten Ausdruck den Faktor ξ_{2n} nach hinten, so ändert sich durch das Antikommutieren von ξ_{2n} mit den $2n-1$ Faktoren ξ_i das Vorzeichen. Ordnen wir also den b reelle Werte zu, so muss für das Produkt aller b längs einer Schleife gelten

$$\prod_{i=1}^{2n} b_{x_i,x_{i+1}} = -1. \tag{6.5}$$

Gilt dies für alle Schleifen, so tragen alle Konfigurationen mit dem gleichen Vorzeichen bei. Man beachte, dass dies zum Beispiel immer für die kleinste Schleife ($n=1$) gilt, da $b_{x,x'} = -b_{x',x}$. Für größere Schleifen gehen wir nun folgendermassen vor: Zunächst überzeugen wir uns, dass es für ein elementares Quadrat gilt

$$b_{k,l;k+1,l}b_{k+1,l;k+1,l+1}b_{k+1,l+1;k,l+1}b_{k,l+1;k,l} = (-)^l \times 1 \times (-(-)^{l+1}) \times (-1) = -1. \tag{6.6}$$

Eine grössere Schleife stellen wir nun dadurch her, dass wir ausgehend von einem solchen elementaren Quadrat jeweils elementare Quadrate anschliessen und dann die Faktoren b an der gemeinsamen Kanten herausnehmen. Für ein Rechteck aus zwei elementaren Quadraten heißt das

$$\begin{aligned} &(b_{k,l;k+1,l}b_{k+1,l;k+1,l+1}b_{k+1,l+1;k,l+1}b_{k,l+1;k,l}) \\ &\times(b_{k+1,l;k+2,l}b_{k+2,l;k+2,l+1}b_{k+2,l+1;k+1,l+1}b_{k+1,l+1;k+1,l}) \\ = &(b_{k,l;k+1,l}b_{k+1,l;k+2,l}b_{k+2,l;k+2,l+1}b_{k+2,l+1;k+1,l+1}b_{k+1,l+1;k,l+1}b_{k,l+1;k,l}) \\ &\times(b_{k+1,l;k+1,l+1}b_{k+1,l+1;k+1,l}). \end{aligned} \tag{6.7}$$

Die linke Seite der Gleichung ergibt $(-1) \times (-1)$, die rechte das gesuchte Produkt mal -1, so dass in der Tat

$$b_{k,l;k+1,l} b_{k+1,l;k+2,l} b_{k+2,l;k+2,l+1} b_{k+2,l+1;k+1,l+1} b_{k+1,l+1;k,l+1} b_{k,l+1;k,l} = -1. \qquad (6.8)$$

Im allgemeinen hat man beim Hinzufügen eines elementaren Quadrates $\nu = 1, 2$ oder 3 gemeinsame Kanten. Dementsprechend ergibt sich einschliesslich des Vorzeichens (-1) für das hinzugefügte elementare Quadrat ein zusätzlicher Faktor $(-)^{\nu-1}$. Gleichzeitig bemerken wir, dass sich die Anzahl der Gitterpunkte im Innern um $\nu - 1$ erhöht. Für das bisher betrachtete elementare Quadrat und das Rechteck der Größe 2×1 ist die Anzahl der inneren Punkte gleich Null. Erstmals für ein Quadrat der Größe 2×2 hat man (genau) einen inneren Punkt. Wir bemerken aber, dass innerhalb einer Schleife eine ganze Anzahl von Dimeren liegen muss, also eine gerade Anzahl von inneren Punkten, so dass für diese Schleifen Gleichung (6.5) erfüllt ist.

Wir schreiten nun zur Auswertung. Offensichtlich können wir die Anzahl N der Dimere schreiben als

$$N = \int \exp\left(\frac{1}{2} \sum_{k,l,k',l'} (\delta_{k,k'} M_{l,l'} + M_{k,k'} D_{l,l'}) \xi_{k,l} \xi_{k',l'}\right) \prod_{k,l} d\xi_{k,l} = \mathrm{pf}(1_w \otimes M_s + M_w \otimes D_s) \qquad (6.9)$$

mit

$$M = \begin{pmatrix} 0 & 1 & & & 0 \\ -1 & 0 & 1 & & \\ & -1 & & ... & \\ & & ... & & 1 \\ 0 & & & -1 & 0 \end{pmatrix} \qquad (6.10)$$

$$D = \begin{pmatrix} -1 & & & & 0 \\ & 1 & & & \\ & & -1 & & \\ & & & ... & \\ 0 & & & & \pm 1 \end{pmatrix}. \qquad (6.11)$$

Die Indices $_w$ und $_s$ an den Matrizen zeigen an, dass es sich um Matrizen der Dimension $L_w \times L_w$ bzw. $L_s \times L_s$, handelt, wenn wir für die Dimere ein Rechteck der Größe $L_w \times L_s$ betrachten. D und M kommutieren nicht. Wir können daher D und M nicht gemeinsam diagonalisieren. Allerdings antikommutieren sie, so dass wir

$$N^4 = \mathrm{pf}(1_w \otimes M_s + M_w \otimes D_s)^4 = \det(1_w \otimes M_s + M_w \otimes D_s)^2 = \det(1_w \otimes M_s^2 + M_w^2 \otimes 1_s) \qquad (6.12)$$

verwenden können. Wir haben hier die Reihenfolge der $d\xi$ und damit das Vorzeichen des Integrals nicht definiert. Da wir (zweimal) quadrieren und wissen, dass das Endergebnis positiv (oder Null) ist, können wir uns das ersparen. Die Matrix im letzten Ausdruck lässt sich diagonalisieren. Haben M_w und M_s die Eigenwerte μ_m und ν_n, dann folgt

$$N^4 = \prod_{m=1}^{L_w} \prod_{n=1}^{L_s} (\mu_m^2 + \nu_n^2). \qquad (6.13)$$

Die Eigenfunktionen $\psi_m(r)$, $r = 1, ..L_w$ von M_w und deren Eigenwerte lassen sich zu

$$\psi_m(r) = i^r sin\left(\frac{\pi r m}{L_w + 1}\right) \quad \mu_m = 2i \cos\left(\frac{\pi m}{L_w + 1}\right) \qquad (6.14)$$

angeben. Die Faktoren i sind beim Einsetzen in (6.13) zu quadrieren. Von den dadurch entstehenden Faktoren -1 hat man $L_s L_w$ im Produkt. Da man Dimerkonfigurationen nur hat, wenn $L_s L_w$ gerade ist, fällt der Vorzeichenfaktor weg. Wir erhalten also für N

$$N^4 = \prod_{m=1}^{L_w} \prod_{n=1}^{L_s} \left(4 \cos^2\left(\frac{\pi m}{L_w + 1}\right) + 4 \cos^2\left(\frac{\pi n}{L_s + 1}\right)\right). \qquad (6.15)$$

Schließlich kann man auch die waagrechten Kanten mit einem Faktor g_w und die senkrechten mit g_s multiplizieren. Dann ergibt sich statt (6.15)

$$N(g_w, g_s)^4 = \prod_{m=1}^{L_w} \prod_{n=1}^{L_s} \left(4g_w^2 \cos^2(\frac{\pi m}{L_w + 1}) + 4g_s^2 \cos^2(\frac{\pi n}{L_s + 1}) \right). \tag{6.16}$$

N wird sich als ein homogenes Polynom in g_w und g_s von Ordnung $L_w L_s/2$ ergeben. Der Koeffizient von $g_w^{k_w} g_s^{k_s}$ gibt dann an, wieviele Dimerkonfigurationen mit k_w waagrechten und k_s senkrechten Kanten vorhanden sind.

Wir unterscheiden nun drei Fälle:
1) Falls L_w und L_s beide ungerade sind, dann verschwindet der Faktor für $m = (L_w + 1)/2$ und $n = (L_s + 1)/2$. Tatsächlich gibt es dann keine Dimer-Konfiguration, $N = 0$.
2) Falls L_w und L_s beide gerade sind, dann kann man $\mu_m = -\mu_{L_w+1-m}$ und $\nu_n = -\nu_{L_s+1-n}$ verwenden, um das Produkt jeweils über die Hälfte der Faktoren zu erstrecken, was

$$N = \prod_{m=1}^{L_w/2} \prod_{n=1}^{L_s/2} \left(4g_w^2 \cos^2(\frac{\pi m}{L_w + 1}) + 4g_s^2 \cos^2(\frac{\pi n}{L_s + 1}) \right) \tag{6.17}$$

ergibt.
3) Falls L_w gerade und L_s ungerade ist, haben wir für $n = (L_s + 1)/2$ Faktoren $\cos^2(\pi m/(L_w + 1))$, was auf

$$N = \prod_{m=1}^{L_w/2} \left(2g_w \cos(\frac{\pi m}{L_w + 1}) \right) \prod_{m=1}^{L_w/2} \prod_{n=1}^{(L_s-1)/2} \left(4g_w^2 \cos^2(\frac{\pi m}{L_w + 1}) + 4g_s^2 \cos^2(\frac{\pi n}{L_s + 1}) \right) \tag{6.18}$$

führt.

Für $L_w = 2$ und $L_s = 3$ erhält man zum Beispiel

$$N = g_w(g_w^2 + 2g_s^2). \tag{6.19}$$

Tatsächlich gibt es eine Konfiguration mit drei waagrechten Kanten und zwei Konfigurationen mit einer waagrechten und zwei senkrechten Kanten.

Man kann auch den Limes unendlich großer Systeme betrachten, indem man den Logarithmus von N als Summe ausdrückt und nach Einführung des Wellenvektors $(\pi m/(L_w + 1), \pi n/(L_s + 1))$ den Kontinuumslimes durchführt. Es folgt für $g_w = g_s = 1$

$$\lim_{L_w, L_s \to \infty} N^{2/(L_w L_s)} = \exp(2C/\pi) = 1.791622... \tag{6.20}$$

mit der Catalanschen Konstante $C = 1 - 1/9 + 1/25 - ... = 0.915965...$. Die Anzahl der Konfigurationen wächst also exponentiell mit der Anzahl der Gitterpunkte an.

Aufgabe

(6.1) Unter Verwendung von $a^n - 1 = \prod_{m=0}^{n-1}(a - \exp(2\pi mi/n))$ und $b^2 + 1 + 2b\cos(\phi) = (b + e^{i\phi})(b + e^{-i\phi})$ lässt sich das Doppelprodukt für N auf ein Einfachprodukt zurückführen. Man führe die Umformung durch.

(6.2) Man berechne die Anzahl der Dimere für ein 4×4-Gitter.

7 Zweidimensionales Ising-Modell

7.1 Das Ising-Modell

Wir wollen nun betrachten, wie man mit Hilfe von Graßmann-Variablen das zweidimensionale Ising-Modell auf einem quadratischen Gitter behandeln kann, genauer gesagt, wie man seine Zustandssumme berechnen kann. Das Ising-Modell wird mit Graßmann-Variablen behandelt in [10, 11, 12, 8].

Auf den Gitterpunkten (k,l) seien Ising-Spins $S_{k,l}$, die die Werte ± 1 annehmen können. Ihre Wechselwirkung sei

$$H = -I_w \sum_{k,l} S_{k,l} S_{k+1,l} - I_s \sum_{k,l} S_{k,l} S_{k.l+1}. \tag{7.1}$$

Die Zustandssumme lautet dann

$$\begin{aligned} Z &= \sum_{\{S\}} \exp(-\beta H) \\ &= \sum_{\{S\}} \prod (\cosh(\beta I_w)(1 + t_w S_{k,l} S_{k+1,l})) \prod (\cosh(\beta I_s)(1 + t_s S_{k,l} S_{k,l+1})), \\ & \quad t_w = \tanh(\beta I_w), \quad t_s = \tanh(\beta I_s). \end{aligned} \tag{7.2}$$

Hierbei ist an jedem Gitterplatz unabhängig $S_{k,l}$ über ± 1 zu summieren. Multipliziert man den Ausdruck unter der Summe aus, so ist es offensichtlich, dass man nur dann einen Beitrag bei der Summation erhält, wenn man an jedem Gitterplatz eine gerade Potenz von $S_{k,l}$ im Polynom hat. Führt man daher für jeden Faktor tSS eine entsprechende Kante im Gitter ein, so kann man auch sagen, dass die Zustandssumme eine Summe von Beiträgen $Ct_w^{2k_w} t_s^{2k_s}$ über alle geschlossenen Graphen auf dem Gitter sind, wobei geschlossen heißt, dass an jedem Gitterpunkt eine gerade Anzahl von Kanten endet. Dabei sind $2k_w$ und $2k_s$ die Anzahl der waagrechten und der senkrechten Kanten im Graphen. Die Zustandssumme wird dann gegeben durch

$$Z = C \sum_{\text{geschlossene Graphen}} t_w^{2k_w} t_s^{2k_s}, \tag{7.3}$$

mit

$$C = 2^N (\cosh(\beta I_w))^{N_w} (\cosh(\beta I_s))^{N_s}. \tag{7.4}$$

N ist die Anzahl der Spins, N_w und N_s sind die Anzahl der Wechselwirkungen I_w und I_s in H.

7.2 Darstellung durch Graßmann-Variable

Wir wollen nun die Zustandssumme durch Graßmann-Variable ausdrücken. Hierzu führen wir an jedem Gitterplatz vier Graßmannvariable ein, die man sich räumlich etwas **o**berhalb, **u**nterhalb, **r**echts und **l**inks angeordnet denken kann und die wir deshalb mit $\zeta_o(k,l)$, $\zeta_u(k,l)$, $\zeta_r(k,l)$ und $\zeta_l(k,l)$ bezeichnen. Für jeden Faktor $1 + t_w S_{k,l} S_{k+1,l}$ führe ich nun einen Faktor

$$1 + t_w a_w \zeta_r(k,l) \zeta_l(k+1,l) = \exp(t_w a_w \zeta_r(k,l) \zeta_l(k+1,l)) \tag{7.5}$$

ein. Die unteren Indices deuten an, dass die Kante von (k,l) nach **r**echts verläuft und von $(k+1,l)$ nach **l**inks. a_w ist ein Faktor, der später so gewählt wird, dass alle Beiträge unter der Summe positiv sind. Entsprechend führe ich für die senkrechten Kanten Faktoren

$$1 + t_s a_s \zeta_o(k,l) \zeta_u(k,l+1) = \exp(t_s a_s \zeta_o(k,l) \zeta_u(k,l+1)) \tag{7.6}$$

ein. An jedem Punkt führen wir dann eine Integration über alle vier ζs aus. Dabei würden wir allerdings nur einen Beitrag erhalten, wenn vier Kanten an dem Punkt enden. Daher führen wir noch einen Faktor $\exp(R(k,l))$ ein mit

$$R(k,l) = \frac{1}{2} \sum_{d,d'} a_{d,d'} \zeta_d(k,l) \zeta_{d'}(k,l), \tag{7.7}$$

wobei d und d' für die vier Richtungen steht und a antisymmetrisch ist. Die Integrale

$$I(f) = \int exp(R) f(\zeta) d\zeta_o d\zeta_u d\zeta_r d\zeta_l \tag{7.8}$$

liefern dann

$$\begin{array}{c|c} I(f) & f \\ \hline 1 & a_{o,u}a_{r,l} - a_{o,r}a_{u,l} + a_{o,l}a_{u,r} \\ \zeta_o\zeta_u & a_{r,l} \\ \zeta_o\zeta_r & -a_{u,l} \\ \zeta_o\zeta_l & a_{u,r} \\ \zeta_u\zeta_r & a_{o,l} \\ \zeta_u\zeta_l & -a_{o,r} \\ \zeta_r\zeta_l & a_{o,u} \\ \zeta_o\zeta_u\zeta_r\zeta_l & 1 \end{array} . \tag{7.9}$$

Falls an einem Gitterpunkt keine Kante endet, verlangen wir natürlich, dass der Gitterpunkt den Faktor 1 beiträgt. Wir verlangen daher, dass

$$a_{o,u}a_{r,l} - a_{o,r}a_{u,l} + a_{o,l}a_{u,r} = 1 \tag{7.10}$$

Insgesamt erhalten wir also, falls wir erreichen können, dass jeder Graph mit dem positiven Vorzeichen beiträgt,

$$Z = C \int exp(\sum_{k,l}(t_w a_w \zeta_r(k,l)\zeta_l(k+1,l) + t_s a_s \zeta_o(k,l)\zeta_u(k,l+1) + R(k,l))) \prod_{k,l} d\zeta_o d\zeta_u d\zeta_r d\zeta_l. \tag{7.11}$$

Wir müssen jetzt noch feststellen, wie wir die Vorzeichen in Ordnung bringen. Dazu zerlegen wir den Graphen in geschlossene, sich nicht überschneidende Schleifen, die wir in Links-Drehung durchlaufen. Dazu lassen wir im Moment den Fall, dass sich an einem Punkt vier Kanten treffen, außer Betracht. Wir haben nun von den durchlaufenen Kanten einer Schleife Faktoren

$$\begin{aligned} & (t_1 a_1 \zeta_{d_1}(x_1)\zeta_{d'_2}(x_2))(t_2 a_2 \zeta_{d_2}(x_2)\zeta_{d'_3}(x_3))...(t_n a_n \zeta_{d_n}(x_n)\zeta_{d'_1}(x_1)) \\ = \quad & -\textstyle\prod_i (t_i a_i)(\zeta_{d'_1}(x_1)\zeta_{d_1}(x_1))(\zeta_{d'_2}(x_2)\zeta_{d_2}(x_2))...(\zeta_{d'_n}(x_n)\zeta_{d_n}(x_n)). \end{aligned} \tag{7.12}$$

Bei der Umordnung wurde der Faktor $\zeta_{d'_1}(x_1)$ an $2n-1$ Faktoren ζ vorbeigeschoben, was zu dem Minuszeichen führt. Nach der Umordnung stehen jeweils zwei Faktoren ζ am gleichen Gitterpunkt beieinander, so dass man diese Paare miteinander kommutieren kann. Wir bezeichnen nun die Anzahl der Faktoren $\zeta_d\zeta_{d'}$, die zum gleichen Ort gehören, mit $n_{d,d'}$. Betrachten wir die Anzahl der Schritte, die in Richtung d laufen mit k_d, so finden wir

$$k_o - n_{u,o} = n_{u,r} + n_{u,l} = n_{r,o} + n_{l,o}, \tag{7.13}$$
$$k_u - n_{o,u} = n_{o,r} + n_{o,l} = n_{r,u} + n_{l,u}, \tag{7.14}$$
$$k_r - n_{l,r} = n_{l,o} + n_{l,u} = n_{o,r} + n_{u,r}, \tag{7.15}$$
$$k_l - n_{r,l} = n_{r,o} + n_{r,u} = n_{o,l} + n_{u,l}. \tag{7.16}$$

Bei Durchlaufen einer Schleife in Linksrichtung ist die Anzahl der Abbiegungen nach links um vier größer als nach rechts. Bei l Schleifen gilt dann

$$4l = n_{o,r} + n_{r,u} + n_{u,l} + n_{l,o} - n_{r,o} - n_{u,r} - n_{l,u} - n_{o,l} \tag{7.17}$$

Diese Gleichungen kann man auflösen zu

$$n_{o,r} = l + n_{l,u}, \tag{7.18}$$
$$n_{u,l} = l + n_{r,o}, \tag{7.19}$$
$$n_{r,u} = l + n_{o,l}, \tag{7.20}$$
$$n_{l,o} = l + n_{u,r} \tag{7.21}$$

Damit bleiben folgende Faktoren, die für ganze n und l Eins ergeben müssen

$$
\begin{aligned}
1 &= (-)^l a_s^{k_o}(-a_s)^{k_u} a_w^{k_r}(-a_w)^{k_l} \prod_{d,d'} I(\zeta_d\zeta_{d'})^{n_{d,d'}} \\
&= (a_s a_w a_{u,l} a_{o,r})^{n_{l,u}+n_{r,o}+l}(-a_s a_w a_{u,r} a_{o,l})^{n_{o,l}+n_{u,r}+l}(-a_s a_{r,l})^{n_{o,u}+n_{u,o}}(-a_w a_{o,u})^{n_{r,l}+n_{l,r}}. \quad (7.22)
\end{aligned}
$$

Dies ist erfüllt für

$$a_s a_w a_{u,l} a_{o,r} = 1, \quad a_s a_w a_{u,r} a_{o,l} = -1, \tag{7.23}$$

$$a_s a_{r,l} = -1, \quad a_w a_{o,u} = -1. \tag{7.24}$$

Bisher haben wir den Fall, dass vier Kanten an einem Gitterpunkt enden, nicht betrachtet. In diesem Fall wollen wir willkürlich festlegen, dass wir unten mit links und oben mit rechts verbinden und dadurch geschlossene Schleifen definieren. Nach dem bisher Gesagten müssen wir dann $I(\zeta_u\zeta_l)I(\zeta_o\zeta_r)$ durch $I(\zeta_u\zeta_l\zeta_o\zeta_r)$ ersetzen. Dies gelingt fehlerfrei, wenn beide Ausdrücke gleich sind, was

$$I(\zeta_u\zeta_l)I(\zeta_o\zeta_r) = I(\zeta_u\zeta_l\zeta_o\zeta_r), \quad a_{o,r}a_{u,l} = -1 \tag{7.25}$$

liefert. Stattdessen hätten wir auch unten mit rechts und oben mit links verbinden können, was auf

$$I(\zeta_u\zeta_r)I(\zeta_o\zeta_l) = I(\zeta_u\zeta_r\zeta_o\zeta_l), \quad a_{o,l}a_{u,r} = 1 \tag{7.26}$$

führt. Man braucht nur eine der Bedingungen (7.25,7.26) erfüllen, aber die zweite sollte äquivalent sein. Mit (7.10) folgt dann

$$a_{o,u}a_{r,l} = -1, \tag{7.27}$$

womit (7.10) erfüllt ist. Die Lösung der Gleichungen ist nicht eindeutig. Eine Lösung ist

$$-a_s = a_w = a_{r,l} = -a_{o,u} = a_{o,r} = -a_{u,l} = a_{o,l} = a_{u,r} = 1. \tag{7.28}$$

Damit haben wir einen Ausdruck für die Zustandssumme in der Form eines Gauß-Integrals über Graßmann-Variable erhalten

$$Z = C\int \exp(G)\prod_{k,l} d\zeta_o d\zeta_u d\zeta_r d\zeta_l, \tag{7.29}$$

$$G = \sum_{k,l}(t_w\zeta_r(k,l)\zeta_l(k+1,l) - t_s\zeta_o(k,l)\zeta_u(k,l+1) + R(k,l)). \tag{7.30}$$

7.3 Auswertung der Zustandssumme

Wir betrachten nun den Fall eines Gitters mit periodischen Randbedingungen und den Ausdehnungen L_w und L_s. Dies entspricht der Topologie eines Torus. Genau genommen stimmt unsere Auswertung dann nicht, da es auch Graphen gibt, bei denen sich eine oder mehrere Schleifen um den Torus wickeln. Für diese gilt die Formel (7.17) für die Anzahl der Schleifen nicht mehr. Für diejenigen, die es genau wissen wollen, gebe ich die Modifikationen unten an. Wir betrachten aber diese Beiträge im Moment nicht und führen nun eine Fourier-Transformation für die Variablen ζ durch, um G auf eine block-diagonale Form zu bringen,

$$\zeta_d(k,l) = \frac{1}{\sqrt{L_w L_s}}\sum_{m=1}^{L_w}\sum_{n=1}^{L_s}\exp(ikp(m)+ilq(n))\xi_d(p,q), \quad p(m) = \frac{2m\pi}{L_w}, \quad q(n) = \frac{2n\pi}{L_s}. \tag{7.31}$$

Dann lautet G

$$G = \sum_{p,q}(t_w\exp(-ip)\xi_r(p,q)\xi_l(-p,-q) - t_s\exp(-iq)\xi_o(p,q)\xi_u(-p,-q) + \frac{1}{2}\sum_{d,d'} a_{d,d'}\xi_d(p,q)\xi_{d'}(-p,-q)). \tag{7.32}$$

Daher ist es ausreichend, jeweils über die $\xi(p,q)$ und $\xi(-p,-q)$ zu integrieren, und das Produkt dieser Determinanten aufzumultiplizieren.

$$\begin{aligned}
Z &= C\prod_{p,q}{}' \det(A(p,q)) && (7.33)\\
\det(A(p,q)) &= \int \exp(\sum_{d,d'} \xi_d(p,q)A_{d,d'}(p,q)\xi_{d'}(-p,-q)) \prod_d (d\xi_d(p,q)d\xi_d(-p,-q)) && (7.34)\\
A(p,q) &= \begin{pmatrix} 0 & -1-t_s e^{-iq} & 1 & 1 \\ 1+t_s e^{iq} & 0 & 1 & -1 \\ -1 & -1 & 0 & 1+t_w e^{-ip} \\ -1 & 1 & -1-t_w e^{ip} & 0 \end{pmatrix}, && (7.35)\\
\det(A(p,q)) &= (1-t_s-t_w-t_st_w)^2 + 2t_s(1-t_w^2)(1-\cos q) + 2t_w(1-t_s^2)(1-\cos p). && (7.36)
\end{aligned}$$

Es gilt $\det(A(p,q)) \geq 0$. Der $'$ zeigt an, dass jeweils nur über die Hälfte der p,q zu multiplizieren ist, so dass neben p,q nicht auch noch $-p,-q$ in der Summe erscheint. Wir müssten noch die Jacobi-Determinante für die Fourier-Transformation von ζ auf ξ einführen. Am Einfachsten ist es, sich klar zu machen, dass das ζ-Integral für $t_w = t_s = 0$ den Wert 1 annimmt. Da die Transformation von t_s und t_w unabhängig ist, muss die Jacobi-Determinante so gewählt werden, dass auch das ξ-Integral in diesem Limes 1 ergibt.

Im thermodynamischen Limes ergibt sich aus (7.33) und (7.36) der Logarithmus der Zustandssumme zu

$$\lim_{L_s,L_w\to\infty} \frac{1}{L_wL_s}\ln Z = \ln(2\cosh(\beta I_w)\cosh(\beta I_s)) + \frac{1}{2(2\pi)^2}\int_{-\pi}^{\pi} dp \int_{-\pi}^{\pi} dq \ln(\det(A(p,q))). \quad (7.37)$$

Diese Zustandssumme hat dort eine Nichtanalytizität, wo die Determinante im Integranden verschwindet. Für ferromagnetische Kopplungen $I_s > 0$, $I_w > 0$ ist das für $1 = t_s + t_w + t_st_w$. Dies bestimmt den kritischen Punkt. Um die Nichtanalytizität zu untersuchen, ist es zweckmäßig, nach β abzuleiten und das Verhalten des Integranden um $p = q = 0$ zu untersuchen. Mit

$$\kappa = 1-t_s-t_w-t_st_w, \quad c_s = t_s(1-t_w^2), \quad c_w = t_w(1-t_s^2) \quad (7.38)$$

folgt für den singulären Anteil der Zustandssumme

$$\frac{d}{d\beta}\left(\frac{1}{L_wL_s}\ln Z_{\text{sing}}\right) = \frac{d\kappa}{d\beta}\frac{\kappa}{(2\pi)^2}\int \frac{dpdq}{\kappa^2 + c_sq^2 + c_wp^2} \quad (7.39)$$

Das Integral hat den nichtanalytischen Anteil

$$-\frac{\pi}{\sqrt{c_sc_w}}\ln(\kappa^2), \quad (7.40)$$

der für die logarithmische Singularität der spezifischen Wärme verantwortlich ist.

Kann man das Verfahren auch auf das Ising-Modell auf anderen Gittern anwenden? So viel bekannt ist, lassen sich alle zweidimensionalen Isingmodelle lösen, wenn sich die Kanten der Wechselwirkungen nicht überkreuzen. Tatsächlich mussten hier eine Reihe von Bedingungen an die Vorzeichen-Koeffizienten a erfüllt werden. Es ist a priori nicht klar, ob diese erfüllt werden können. Versucht man das Verfahren auf das dreidimensionale Gitter zu übertragen, so besteht das Problem, dass man auch dort den Faktor $(-)^l$ hat, wobei l die Anzahl der Schleifen ist, dass man dort aber keine zu (7.17) analoge Beziehung hat. Daran scheitert die Übertragung auf drei Dimensionen.

7.4 Genauere Behandlung der Randbedingungen

Wir wollen nun noch betrachten, wie die Rechnung zu modifizieren ist, wenn geschlossene Schleifen um den Torus laufen. Für diese gilt statt (7.17)

$$0 = n_{o,r} + n_{r,u} + n_{u,l} + n_{l,o} - n_{r,o} - n_{u,r} - n_{l,u} - n_{o,l}, \quad (7.41)$$

da für diese Schleifen die Anzahl der Rechts-Abbiegungen gleich der Anzahl der Links-Abbiegungen sein muss. Wir müssen also das Minuszeichen, das durch Vertauschen eines Faktors ζ mit den übrigen entsteht, (7.12), auf andere Weise einbringen. Dies kann dadurch geschehen, dass man am Rand für a_w bzw. a_s das umgekehrte Vorzeichen einführt. Genauer gesagt, ersetzen wir beispielsweise das a_w in den Termen $\zeta_r(N_w,l)\zeta_l(1,l)$ durch $-a_w$. Läuft dann eine Schleife einmal in waagrechter Richtung durch den Torus, so erhält sie den gewünschten Faktor -1. Dies ändert für Schleifen, die sich nicht um den Torus winden, nichts, da dann das negative Vorzeichen sowohl bei Überschreiten des "Randes" nach rechts wie nach links eingeht. Anstatt a_w durch $-a_w$ zu ersetzen, können wir auch antiperiodische Randbedingungen fordern $\zeta_d(k+N_w,l) = -\zeta_d(k,l)$. Entsprechendes gilt auch in senkrechter Richtung. Wir können nun vier Fälle unterscheiden, da wir die Randbedingungen in beiden Richtungen unabhängig wählen können und bezeichnen die mit den entsprechenden Randbedingungen gewonnenen Zustandssummen mit $Z_{\pm,\pm}$, wobei das Plus für periodische und das Minus für antiperiodische Randbedingungen steht. Wir behaupten

$$Z = \frac{-Z_{++} + Z_{+-} + Z_{-+} + Z_{--}}{2}. \tag{7.42}$$

Um dies zu verifizieren, bezeichnen wir die Anzahl von Windungen einer Schleife in senkrechter und waagrechter Richtung mit w_w und w_s. Sind mehrere solcher Schleifen vorhanden, so müssen sie in diesen Windungszahlen übereinstimmen, da sie sich nicht überschneiden dürfen. Ist die Anzahl der Windungen eine gerade Zahl, so ergibt jede Wahl der Randbedingungen das korrekte Vorzeichen, so dass diese Schleifen-Konfigurationen in (7.42) korrekt gezählt wird. Ist die Anzahl der Schleifen ungerade, so ist wesentlich, dass w_w und w_s teilerfremd sind. Wären sie nicht teilerfremd, dann müssten sich die Schleifen selbst überschneiden, was nicht erlaubt ist. Das heißt aber, dass w_w und w_s nicht beide gerade sein können. In den anderen Fällen kann man nun leicht bestimmen, mit welchem Vorzeichen der Beitrag in $Z_{\pm,\pm}$ eingeht. Wir finden

w_w	w_s	Z_{++}	Z_{+-}	Z_{-+}	Z_{--}
gerade	ungerade	-1	1	-1	1
ungerade	gerade	-1	-1	1	1
ungerade	ungerade	-1	1	1	-1

(7.43)

Man sieht nun, dass in allen drei Fällen die Summe der rechten Seite von (7.42) die Beiträge mit dem Gewicht $+1$ mitnimmt. Durch die Randbedingungen werden in (7.31) die p und q geändert

$$p(m) = \begin{cases} \frac{2m\pi}{L_w} & \text{periodisch} \\ \frac{(2m+1)\pi}{L_w} & \text{antiperiodisch} \end{cases} \quad \text{in waagrechter Richtung,} \tag{7.44}$$

$$q(n) = \begin{cases} \frac{2n\pi}{L_s} & \text{periodisch} \\ \frac{(2n+1)\pi}{L_s} & \text{antiperiodisch} \end{cases} \quad \text{in senkrechter Richtung.} \tag{7.45}$$

Schließlich sei noch bemerkt, dass wir oben bei der Auswertung der ζ-Integrale implizit angenommen haben, dass p und q verschieden von 0 oder einem Vielfachen von π sind. Sind aber beide ein Vielfaches von π, dann ist $\xi_d(p,q) = \xi_d(-p,-q)$, so dass an die Stelle von $\det(A(p,q))$ nur die entsprechende Pfaffsche Form $\mathrm{pf}(A(p,q))$ tritt, die zwar die Quadratwurzel von $\det(A(p,q))$ ist, der man aber das Vorzeichen nicht ansieht. Tatsächlich findet man leicht

$$\begin{aligned} \mathrm{pf}(0,0) &= 1 - t_s - t_w - t_s t_w, & \mathrm{pf}(0,\pi) &= 1 + t_s - t_w + t_s t_w, \\ \mathrm{pf}(\pi,0) &= 1 - t_s + t_w + t_s t_w, & \mathrm{pf}(\pi,\pi) &= 1 + t_s + t_w - t_s t_w. \end{aligned} \tag{7.46}$$

Man beobachtet, dass $\mathrm{pf}(0,0)$ und damit Z_{++} am kritischen Punkt sein Vorzeichen wechselt. Auf Grund dieser genaueren Analyse ist man erstaunt, dass das erste Verfahren trotzdem im thermodynamischen Limes das korrekte Ergebnis gibt.

Aufgaben

(7.1) Warum ergibt im thermodynamischen Limes die Auswertung von (7.37) das richtige Ergebnis, obwohl man (7.42) hätte verwenden müssen?

(7.2) Man verwandle die Doppelprodukte für die Zustandssumme in ein Einfachprodukt unter Verwendung der Anleitung zur Aufgabe in Abschnitt 6.

8 Start in die Superalgebra: Matrizen

Bisher haben wir die Algebra von Graßmann-wertigen Ausdrücken und die Differentiation und Integration bezüglich Graßmann-Variablen behandelt. Wir haben es aber vermieden, zwischen Ausdrücken aus $\mathcal{A}_+$ und $\mathcal{A}_-$ zu transformieren. Dies soll von nun an getan werden. Dann ergeben sich zum Beispiel Symmetrien, die beide Arten von Variablen umfassen. Zum Einstieg verwenden wir das Differential, das unmittelbar auf Matrizen mit Einträgen sowohl gerader als auch ungerader Elemente führt. Ein kurzer Abriss zu Super-Matrizen und Super-Gruppen findet sich in [13].

8.1 Differential, Matrizen, Transposition

Wir betrachten nun den Fall, dass Funktionen Z_k von Variablen Y_k abhängen, wobei $Z_1, ...Z_{n_1} \in \mathcal{A}_+$, $Z_{n_1+1}, ...Z_{n_1+m_1} \in \mathcal{A}_-$ und $Y_1, ...Y_{n_2} \in \mathcal{A}_+$, $Y_{n_2+1}, ...Y_{n_2+m_2} \in \mathcal{A}_-$. Falls die Funktionen differenzierbar sind, schreiben wir

$$dZ_k = \sum_l W_{kl} dY_l \text{ mit } W_{kl} = \partial Z_k / \partial Y_l. \tag{8.1}$$

Die Matrix W zerfällt in vier Blöcke

$$W = \begin{pmatrix} a & \alpha \\ \beta & b \end{pmatrix} \tag{8.2}$$

mit den Matrizen a und b, deren Elemente aus $\mathcal{A}_+$ sind und Matrizen α und β mit Elementen aus $\mathcal{A}_-$. a und α haben n_1, b und β m_1 Zeilen, a und β n_2, b und α m_2 Spalten. Die Menge dieser Matrizen (8.2) sei mit $\mathcal{M}(n_1, m_1, n_2, m_2)$ bezeichnet. Statt (8.1) kann man auch

$$dZ_k = \sum_l dY_l W^T_{lk} \text{ mit } W^T_{lk} = \frac{\partial}{\partial Y_l} Z_k \tag{8.3}$$

schreiben. Dabei heißt W^T die Supertransponierte von W,

$$W^T = \begin{pmatrix} a^t & \beta^t \\ -\alpha^t & b^t \end{pmatrix} \in \mathcal{M}(n_2, m_2, n_1, m_1). \tag{8.4}$$

Je nachdem, wie W^T eingeführt wird, kann das Minuszeichen auch vor dem β anstatt vor dem α erscheinen. Man überzeuge sich von der jeweiligen Vorzeichenkonvention. Der Index ^{t} bezeichnet das Transponierte der Matrix, z.B. ${\beta^t}_{kl} = \beta_{lk}$. Das Minuszeichen in (8.4) rührt vom Operator $\mathcal{P}$ in (3.1) her. Wir bemerken, dass

$$W^{TT} = \begin{pmatrix} a & -\alpha \\ -\beta & b \end{pmatrix} = \mathcal{P}(W) = \sigma^{(n_1,m_1)} W \sigma^{(n_2,m_2)} \text{ mit } \sigma^{(n,m)} = \begin{pmatrix} 1_n & 0 \\ 0 & -1_m \end{pmatrix} \tag{8.5}$$

nicht identisch mit W ist. Erst W^{TTTT} stimmt wieder mit W überein. Neben der Supertransponierten führt man noch die gewöhnliche Transponierte ein

$$W^t = \begin{pmatrix} a^t & \beta^t \\ \alpha^t & b^t \end{pmatrix} \in \mathcal{M}(n_2, m_2, n_1, m_1). \tag{8.6}$$

8.2 Kettenregel, Matrizenmultiplikation

Es seien nun die Y_l differenzierbare Funktionen von Variablen X_j mit $X_1, ...X_{n_3} \in \mathcal{A}_+$, $X_{n_3+1}, ...$ $X_{n_3+m_3} \in \mathcal{A}_-$

$$dY_l = \sum_j V_{lj} dX_j = \sum_j dX_j V^T_{jl}. \tag{8.7}$$

Dann folgt

$$dZ_k = \sum_j (\sum_l W_{kl} V_{lj}) dX_j = \sum_j dX_j (\sum_l V^T_{jl} W^T_{lk}). \tag{8.8}$$

Diese Gleichung schließt die Kettenregel ein

$$\partial Z/\partial X_j = \sum_l (\partial Z/\partial Y_l)(\partial Y_l/\partial X_j). \tag{8.9}$$

Wir nehmen Gleichung (8.9) zum Anlass, das Matrixprodukt $WV \in \mathcal{M}(n_1, m_1, n_3, m_3)$ für Matrizen $W \in \mathcal{M}(n_1, m_1, n_2, m_2)$ und $V \in \mathcal{M}(n_2, m_2, n_3, m_3)$ einzuführen

$$(WV)_{kj} = \sum_l W_{kl} V_{lj}. \tag{8.10}$$

Man verifiziert

$$(WV)^T = V^T W^T. \tag{8.11}$$

Eine ähnliche Beziehung gibt es für die gewöhnlich Transponierte nicht.

Fügen wir die Komponenten von X, Y und Z zu einspaltigen Matrizen (Spaltenvektoren) aus $\mathcal{M}(n_i, m_i, 1, 0)$ zusammen, so nehmen die Gleichungen (8.1,8.3,8.8) die Form

$$dZ = W dY = WV dX, \tag{8.12}$$
$$dZ^T = dY^T W^T = dX^T V^T W^T \tag{8.13}$$

an. Man verifiziert, dass die Matrizenmultiplikation dem Assoziativ- und dem Distributivgesetz genügt, wobei die Matrizenaddition als Addition der Elemente gleicher Indices wie üblich definiert ist. Offensichtlich bilden die Matrizen der Menge $\mathcal{M}(n, m, n, m)$ mit diesen Operationen mit festem n und m eine Algebra. Wir bezeichnen Matrizen aus $\mathcal{M}(n, m, n, m)$ als quadratische Matrizen.

8.3 Super-Determinante als Jacobi-Determinante

Wir fragen nun, wie für die Transformation (8.1) die Jacobi-Determinante aussieht. Hierzu teilen wir die Transformation (8.1) in zwei Schritte auf, wobei wir einmal die Z aus $\mathcal{A}_+$, das andere Mal die Z aus $\mathcal{A}_-$ transformieren

$$\begin{aligned}
&(dZ_1, ..., dZ_n, dZ_{n+1}, ..., dZ_{n+m}) \leftarrow \\
&(dZ_1, ..., dZ_n, dY_{n+1}, ..., dY_{n+m}) \leftarrow \\
&\quad (dY_1, ..., dY_n, dY_{n+1}, ..., dY_{n+m}).
\end{aligned} \tag{8.14}$$

Dies entspricht der Zerlegung von W in

$$W = \begin{pmatrix} a & \alpha \\ \beta & b \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ \beta' & b' \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a' & \alpha' \\ 0 & 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} a' & \alpha' \\ \beta' a' & b' + \beta' \alpha' \end{pmatrix}. \tag{8.15}$$

Die Auflösung nach den gestrichenen Größen ergibt die Zerlegung

$$W = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ \beta a^{-1} & b - \beta a^{-1} \alpha \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a & \alpha \\ 0 & 1 \end{pmatrix}. \tag{8.16}$$

Wir wissen nun, dass die erste Transformation einen Faktor $1/\det(b')$, die zweite den Faktor $\det(a)$ beiträgt. Insgesamt erhält man also

$$\int f(Z_1, ..., Z_{n+m}) \prod_k dZ_k = \int f(Z_1(Y_1, ...), ..., Z_{n+m}(Y_1, ...)) \mathrm{sdet}(W) \prod_k dY_k \tag{8.17}$$

mit der Jacobi-Form

$$\mathrm{sdet} \begin{pmatrix} a & \alpha \\ \beta & b \end{pmatrix} = \frac{\det(a)}{\det(b - \beta a^{-1} \alpha)}, \tag{8.18}$$

die man als Superdeterminante bezeichnet. An Stelle der Transformation (8.14) hätten wir diese auch in der Reihenfolge

$$\begin{aligned}(dZ_1, ..., dZ_n, dZ_{n+1}, ..., dZ_{n+m}) \leftarrow \\ (dY_1, ..., dY_n, dZ_{n+1}, ..., dZ_{n+m}) \leftarrow \\ (dY_1, ..., dY_n, dY_{n+1}, ..., dY_{n+m}).\end{aligned} \tag{8.19}$$

durchführen können. Dann ist W zu zerlegen in

$$W = \begin{pmatrix} a & \alpha \\ \beta & b \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} a' & \alpha' \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ \beta' & b' \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} a' + \alpha'\beta' & \alpha' b' \\ \beta' & b' \end{pmatrix}, \tag{8.20}$$

was auf

$$W = \begin{pmatrix} a - \alpha b^{-1}\beta & \alpha b^{-1} \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ \beta & b \end{pmatrix} \tag{8.21}$$

führt. Daraus folgt dann für die Superdeterminante die Darstellung

$$\mathrm{sdet} \begin{pmatrix} a & \alpha \\ \beta & b \end{pmatrix} = \frac{\det(a - \alpha b^{-1}\beta)}{\det(b)}. \tag{8.22}$$

Für die in (8.8) betrachtete Transformation $Z \leftarrow Y \leftarrow X$ folgt dann

$$\begin{aligned} \int f(Z) \prod dZ &= \int f(Z(Y)) \mathrm{sdet}(W) \prod dY \\ = \int f(Z(Y(X))) \mathrm{sdet}(W) \mathrm{sdet}(V) \prod dX &= \int f(Z(Y(X))) \mathrm{sdet}(WV) \prod dX. \end{aligned} \tag{8.23}$$

Daher gilt der Determinantenmultiplikationssatz auch für Superdeterminanten

$$\mathrm{sdet}(WV) = \mathrm{sdet}(W)\mathrm{sdet}(V). \tag{8.24}$$

Für Determinanten gilt, dass sie unter Transposition der Matrix erhalten bleiben, $\det(a) = \det(a^t)$. Für die Superdeterminante kann man unter Verwendung von (8.4) und (8.18) oder (8.22) zeigen, dass

$$\mathrm{sdet}(W) = \mathrm{sdet}(W^T). \tag{8.25}$$

8.4 Superspur

Wir betrachten nun

$$\begin{aligned} \mathrm{sdet}(\exp(W)) &= \lim_{n\to\infty} \mathrm{sdet}[(1 + \frac{W}{n})^n] = \lim_{n\to\infty} [\mathrm{sdet}(1 + \frac{W}{n})]^n = \lim_{n\to\infty} [\frac{\det(1 + \frac{a}{n} - \frac{\alpha}{n}\frac{1}{1+b/n}\frac{\beta}{n})}{\det(1 + \frac{b}{n})}]^n \\ &= \lim_{n\to\infty} (1 + \frac{1}{n}(\mathrm{tr}a - \mathrm{tr}b))^n = \exp(\mathrm{tr}a - \mathrm{tr}b) \end{aligned} \tag{8.26}$$

Man bezeichnet

$$\mathrm{str}(W) = \mathrm{str} \begin{pmatrix} a & \alpha \\ \beta & b \end{pmatrix} = \mathrm{tr}a - \mathrm{tr}b \tag{8.27}$$

als die Superspur von W. Wir haben damit

$$\mathrm{sdet}(\exp(W)) = \exp(\mathrm{str}(W)). \tag{8.28}$$

Die Aussagen für die Superdeterminanten und die Superspur galten für quadratische Matrizen (sonst sind sie nicht definiert). Für zwei Matrizen $W \in \mathcal{M}(n_1, m_1, n_2, m_2)$, $V \in \mathcal{M}(n_2, m_2, n_1, m_1)$ zeigt man durch elementares Ausmultiplizieren

$$WV = \begin{pmatrix} a & \alpha \\ \beta & b \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c & \gamma \\ \delta & d \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} ac + \alpha\delta & ... \\ ... & bd + \beta\gamma \end{pmatrix}, \quad VW = \begin{pmatrix} ca + \gamma\beta & ... \\ ... & db + \delta\alpha \end{pmatrix}. \tag{8.29}$$

Da $\mathrm{tr}(ac) = \mathrm{tr}(ca)$ und $\mathrm{tr}(\alpha\delta) = -\mathrm{tr}(\delta\alpha)$, folgt die zyklische Invarianz der Superspur

$$\mathrm{str}(WV) = \mathrm{str}(VW). \tag{8.30}$$

Aufgaben:

(8.1) Man überprüfe für eine Matrix $\in \mathcal{M}(1,1,1,1)$ die Gleichheit der Superdeterminante nach (8.18) und (8.22).

(8.2) Berechne das Inverse von $\begin{pmatrix} a & \alpha \\ \beta & b \end{pmatrix} \in \mathcal{M}(n,m,n,m)$.

(8.3) Man zeige (8.25).

9 S-Symmetrische Matrizen

9.1 Bilinear-Form

Wir führen nun eine Bilinearform zweier Vektoren $S, T \in \mathcal{M}(n, m, 1, 0)$ ein

$$(S, T) = S^T W T \tag{9.1}$$

mit einer Matrix $W \in \mathcal{M}(n, m, n, m)$. Wenn wir für alle S, T die Symmetriebeziehung

$$(T, S) = (S, T) \tag{9.2}$$

fordern, dann folgtmit (8.5) und (8.11)

$$(T, S) = T^T W S = (S^T W T)^T = T^T W^T S^{TT} = T^T W^T \sigma S. \tag{9.3}$$

W muss daher

$$W = W^T \sigma \text{ oder } W = \begin{pmatrix} a & \alpha \\ -\alpha^t & b \end{pmatrix} \text{ mit } a^t = a,\ b^t = -b \tag{9.4}$$

genügen. Eine derartige Matrix würde ich gerne supersymmetrisch nennen. Da der Begriff aber schon belegt ist, bezeichne ich sie als s-symmetrisch. Entsprechend nennen wir eine Matrix, die $W = -W^T \sigma$ genügt, als antisymmetrisch. Jede quadratische Matrix kann als Summe einer symmetrischen und einer antisymmetrischen Matrix dargestellt werden.

9.2 Gauß-Integrale IV

Speziell für $m = 0$ oder $n = 0$ haben wir die s-symmetrische Matrix bereits bei den Gauß-Integralen (5.2) und (5.22) kennen gelernt. Mit einem s-symmetrischen W bezeichne ich das Integral

$$\mathrm{spf}(W) = \int \exp(-\frac{1}{2} X^T W X)[DX] \tag{9.5}$$

als die Superpfaffsche Form der s-symmetrischen Matrix W, wobei

$$[DX] = \prod_{i=1}^{n} \frac{dx_i}{\sqrt{2\pi}} d\xi_1 d\xi_2 ... d\xi_m. \tag{9.6}$$

Mit der Substitution $X = VY$ folgt

$$\mathrm{spf}(W) = \mathrm{sdet}(V) \int \exp(-\frac{1}{2} Y^T V^T W V Y)[DY] = \mathrm{sdet}(V)\mathrm{spf}(V^T W V). \tag{9.7}$$

Speziell

$$V = \begin{pmatrix} 1 & -a^{-1}\alpha \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \tag{9.8}$$

gibt

$$V^T W V = \begin{pmatrix} a & 0 \\ 0 & b + \alpha^t a^{-1} \alpha \end{pmatrix} \tag{9.9}$$

und damit

$$\mathrm{spf} \begin{pmatrix} a & \alpha \\ -\alpha^t & b \end{pmatrix} = \frac{\mathrm{pf}(b + \alpha^t a^{-1} \alpha)}{\sqrt{\det(a)}}. \tag{9.10}$$

Andererseits gibt

$$V = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ b^{-1}\alpha^t & 1 \end{pmatrix} \tag{9.11}$$

$$V^T W V = \begin{pmatrix} a + \alpha b^{-1} \alpha^t & 0 \\ 0 & b \end{pmatrix} \tag{9.12}$$

und damit

$$\mathrm{spf}\begin{pmatrix} a & \alpha \\ -\alpha^t & b \end{pmatrix} = \frac{\mathrm{pf}(b)}{\sqrt{\det(a+\alpha b^{-1}\alpha^t)}}. \tag{9.13}$$

Wir fügen nun im Exponenten des Gauß-Integrals (9.5) noch einen linearen Term $A^T X = X^T \sigma A$ mit $A \in \mathcal{M}(n, m, 1, 0)$ hinzu. Durch Bildung der quadratischen Ergänzung finden wir

$$\int \exp(-\frac{1}{2}X^T W X + A^T X)[DX] = \mathrm{spf}(W)\exp(\frac{1}{2}A^T W^{-1}\sigma A) \tag{9.14}$$

Diese Formel ist natürlich nur anwendbar, wenn W invertierbar ist, was insbesondere ein gerades m voraussetzt. Für ungerades m erhält man für verschwindenden Vektor A Null. Für endliches A kann sich trotz Nichtinvertierbarkeit von W etwas endliches ergeben.

9.3 Orthosymplektische Transformation und Gruppe

In reellen (auch in komplexen) Vektorräumen führt man orthogonale Transformationen U ein, die die Eigenschaft haben, dass sie die Einheitsmatrix invariant lassen, $U^t 1 U = 1$. Etwas entsprechendes wollen wir auch für die quadratischen Matrizen einführen. Dabei soll eine s-symmetrische Matrix G in sich übergehen. Wir können nicht die Einheitsmatrix verwenden, da sie nicht s-symmetrisch ist. Vielmehr wollen wir $G = \begin{pmatrix} 1_n & 0 \\ 0 & g \end{pmatrix}$ wählen, wobei g antisymmetrisch sein muss. Weiterhin wollen wir verlangen, dass G invertierbar ist. Das ist nur möglich, wenn m gerade ist, $m = 2r$. Wir schreiben dann

$$G^{(n,2r)} = \begin{pmatrix} 1_n & 0 \\ 0 & \epsilon_r \end{pmatrix} \in \mathcal{M}(n, 2r, n, 2r), \quad \epsilon_r = \begin{pmatrix} \epsilon & & & 0 \\ & \epsilon & & \\ & & \cdots & \\ 0 & & & \epsilon \end{pmatrix}, \quad \epsilon = \begin{pmatrix} 0 & -1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}. \tag{9.15}$$

Das Skalarprodukt definieren wir dann zu

$$(S, T)_G = S^T G T. \tag{9.16}$$

Lineare Transformationen

$$S' = US, \quad T' = UT, \tag{9.17}$$

die das Skalarprodukt invariant lassen, heißen orthosymplektisch. Sie genügen offensichtlich der Gleichung

$$U^T G U = G. \tag{9.18}$$

Diese Transformationen bilden unter derMultiplikation eine Gruppe. Wir beobachten

$$G^T = \sigma G = G\sigma, \quad \mathrm{sdet}(G) = 1, \quad G^2 = \sigma \tag{9.19}$$

und finden aus

$$\mathrm{sdet}(U^T G U) = (\mathrm{sdet}(U))^2 \mathrm{sdet}(G) = \mathrm{sdet}(G), \tag{9.20}$$

dass

$$\mathrm{sdet}(U) = \pm 1. \tag{9.21}$$

Aufgabe

(9.1) Was erhält man für das Gauß-Integral (9.14), wenn man den linearen Term als $A^T G X$ vorgibt?

10 Das konjugiert Komplexe

Wir wollen nun auch die Operation des konjugiert Komplexen einführen. Es stellt sich heraus, dass es zwei konsistente und wesentlich verschiedene Möglichkeiten gibt, diese einzuführen. Wir bezeichnen sie daher als konjugiertes 1. und 2. Art.

Das Konjugierte 1. Art Wir bezeichnen es mit * und fordern

$$1^* = 1, \quad a \in \mathcal{A}_\pm \to a^* \in \mathcal{A}_\pm, \quad (a+b)^* = a^* + b^*. \tag{10.1}$$

Diese drei Beziehungen gelten übrigens auch für das Konjugierte 2. Art. Zusätzlich müssen wir noch angeben, was die zweifache Konjugation bringt und wie ein Produkt in sein Konjugiertes übergeführt wird. Für das Konjugierte 1. Art fordern wir

$$a^{**} = a, \quad (ab)^* = b^* a^*. \tag{10.2}$$

Das Konjugierte 2. Art Wir bezeichnen es mit $^\times$ und verlangen wie in (10.1)

$$1^\times = 1, \quad a \in \mathcal{A}_\pm \to a^\times \in \mathcal{A}_\pm, \quad (a+b)^\times = a^\times + b^\times. \tag{10.3}$$

Hingegen haben wir jetzt an Stelle von (10.2)

$$a^{\times\times} = \mathcal{P}(a), \text{ also } a^{\times\times} = a \text{ für } a \in \mathcal{A}_+ \text{ und } a^{\times\times} = -a \text{ für } a \in \mathcal{A}_- \tag{10.4}$$

und

$$(ab)^\times = a^\times b^\times. \tag{10.5}$$

Man mag sich zunächst wundern, dass es zwei verschiedene antilineare Abbildungen gibt. Tatsächlich hat man aber auch in der Quantenmechanik zwei verschiedene antilineare Abbildungen: Die eine stellt den Übergang zum hermitesch Adjungierten dar und entspricht dem Konjugierten 1. Art. Bei dieser Operation gelten die Gesetze (10.2). Dagegen entspricht die antilineare Operation der Zeitumkehr dem Konjugierten 2. Art. Bei dieser Operation gehen etwa Erzeugungsoperatoren a und b in ihr Zeitumgekehrtes über, ohne dass sich ihre Reihenfolge ändert. Dort gilt auch, dass der Erzeuger eines Fermions (bzw. ein Ein-Fermion-Zustand) bei zweimaliger Zeitumkehr in sein Negatives übergeht in Übereinstimmung mit (10.4) und (10.5). Wir sehen hieraus, dass beide Operationen der Konjugation simultan auftreten können.

Wir bemerken, dass für den ordentlichen Anteil (2.13), d.h. für komplexe Zahlen, die uns gewohnten Rechenregeln gelten und hier nicht zwischen den beiden Arten der Konjugation zu unterscheiden ist. Für das Konjugierte 1. Art ist stets eine Zerlegung in Realteil und Imaginärteil möglich, da

$$(a \pm a^*)^* = \pm(a \pm a^*). \tag{10.6}$$

Das entsprechende gilt auch für das Konjugierte 2. Art, wenn $a \in \mathcal{A}_+$. Dagegen ist das für das Konjugierte 2. Art nicht für $a \in \mathcal{A}_-$ möglich. Es gibt keinen Zustand mit ungerader Fermionzahl, der zeitumkehrinvariant wäre.

Aufgabe

(10.1) Man zeige, dass für $a, b \in \mathcal{A}_-$ sowohl $(a^* b)^* = b^* a$ als auch $(a^\times b)^\times = b^\times a$ gilt.

(10.2) Man zeige, dass $(WV)^\times = W^\times V^\times$. Warum gilt im allgemeinen $(WV)^* \neq W^* V^*$? Dabei wird unter den Operationen $^\times$ und * angewandt auf eine Matrix verstanden, dass diese Operation auf jedes Matrixelement einzeln angewandt wird.

11 Adjungiertes, Skalarprodukt, superunitäre Gruppen

11.1 Das Adjungierte

Wir definieren nun das Adjungierte $W^\dagger \in \mathcal{M}(n_2,m_2,n_1,m_1)$ erster Art von $W \in \mathcal{M}(n_1,m_1,n_2,m_2)$ durch die Forderung

$$\left(\sum_{i,j} S_i^* W_{i,j} T_j\right)^* = \sum_{i,j} T_j^* (W^\dagger)_{j,i} S_i \tag{11.1}$$

für alle Vektoren $S \in \mathcal{M}(n_1,m_1,1,0)$, $T \in \mathcal{M}(n_2,m_2,1,0)$. Die linke Seite ergibt $\sum_{i,j} T_j^* W_{i,j}^* S_i$, so dass

$$(W^\dagger)_{j,i} = W_{i,j}^*, \text{ d. h. } W^\dagger = W^{t*} \tag{11.2}$$

folgt. Man sieht leicht, dass daraus

$$W^{\dagger\dagger} = W, \quad (WV)^\dagger = V^\dagger W^\dagger \tag{11.3}$$

und für quadratische Matrizen W

$$\mathrm{sdet}(W^\dagger) = \mathrm{sdet}\begin{pmatrix} a^{t*} & \beta^{t*} \\ \alpha^{t*} & b^{t*} \end{pmatrix} = \frac{\det(a^{t*} - \beta^{t*}(b^{t*})^{-1}\alpha^{t*})}{\det(b^{t*})} = \frac{\det((a-\alpha b^{-1}\beta)^{t*})}{\det(b^{t*})} = (\mathrm{sdet}(W))^* \tag{11.4}$$

folgt. Eine Matrix, für die $W = W^\dagger$ gilt, heißt hermitesch (erster Art).

Ähnlich definieren wir das Adjungierte $W^\ddagger$ zweiter Art von W durch die Forderung

$$\left(\sum_{i,j} S_i^\times W_{i,j} T_j\right)^\times = \sum_{i,j} T_j^\times (W^\ddagger)_{j,i} S_i. \tag{11.5}$$

Die linke Seite ergibt $\pm T_j^\times W_{i,j}^\times S_i$, wobei für die ungeraden Elemente aus T und die geraden aus S das Minuszeichen zu wählen ist, für die übrigen das Pluszeichen, so dass

$$W^\ddagger = W^{T\times} \tag{11.6}$$

folgt. Man überzeugt sich, dass

$$W^{\ddagger\ddagger} = W, \quad (WV)^\ddagger = V^\ddagger W^\ddagger \tag{11.7}$$

und für quadratische Matrizen W

$$\mathrm{sdet}(W^\ddagger) = (\mathrm{sdet}(W))^\times \tag{11.8}$$

gilt. Matrizen $W = W^\ddagger$ heißen hermitesch (zweiter Art).

11.2 Skalarprodukt, (pseudo)superunitäre Gruppe

Wir betrachten zunächst superunitäre Gruppen erster Art und definieren das Skalarprodukt für zwei Vektoren $S, T \in \mathcal{M}(n,m,1,0)$

$$(S,T)_1 = S^\dagger g T, \quad (T,S)_1 = (S,T)_1^* \tag{11.9}$$

wobei wir im Allgemeinen eine indefinite Metrik zulassen,

$$g = \begin{pmatrix} 1_{n'} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1_{n"} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1_{m'} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1_{m"} \end{pmatrix} \quad n = n' + n", \quad m = m' + m". \tag{11.10}$$

Lineare Transformationen $S' = US$, $T' = UT$, die $(S,T)_1$ invariant lassen, heißen pseudounitär erster Art. Sie genügen

$$U^\dagger g U = g \tag{11.11}$$

und bilden die pseudosuperunitäre Gruppe erster Art $\mathrm{UPL}_1(n', n", m', m")$. Falls $n" = m" = 0$, dann ist $g = 1_{n+m}$ und es handelt sich um die superunitäre Gruppe $\mathrm{UPL}_1(n, m)$.

Bei der Definition der (pseudo)superunitären Gruppe zweiter Art geht man entsprechend vor, nur verwendet man die Operation ‡ statt †,

$$(S, T)_2 = S^\ddagger g T, \quad (T, S)_2 = (S, T)_2^\times. \tag{11.12}$$

Transformationen $S' = US$, $T' = UT$ mit

$$U^\ddagger g U = g \tag{11.13}$$

lassen das Skalarprodukt invariant. Dabei handelt es sich um die Gruppe $\mathrm{UPL}_2(n', n", m', m")$ der pseudosuperunitären Transformationen zweiter Art. Analog auch die Gruppe der superunitären Transformationen $\mathrm{UPL}_2(n, m) = \mathrm{UPL}_2(n, 0, m, 0)$.

11.3 Gauß-Integrale V

Wir betrachten das Gauß-Integral

$$\int \exp(-Z^\dagger W Z)[DZ], \quad Z \in \mathcal{M}(n, m, 1, 0) \tag{11.14}$$

wobei die Komponenten $Z = z$ aus $\mathcal{A}_+$ komplex seien, während die Komponenten $Z = \zeta$ aus $\mathcal{A}_-$ unabhängig von ihrem konjugiert Komplexen seien. Es sei

$$[DZ] = \prod_{k=1}^{n} (d\Re z_k d\Im z_k / \pi) \prod_{k=n+1}^{n+m} (d\zeta_k d\zeta_k^*). \tag{11.15}$$

Durch Ergänzen der z-Komponenten

$$Z^\dagger W Z = (z^\dagger + \zeta^\dagger \beta a^{-1}) a (z + a^{-1}\alpha\zeta) + \zeta^\dagger (b - \beta a^{-1}\alpha)\zeta \tag{11.16}$$

erhält man

$$\int \exp(-Z^\dagger W Z)[DZ] = \frac{\det(b - \beta a^{-1}\alpha)}{\det(a)} = \frac{1}{\mathrm{sdet}(W)}. \tag{11.17}$$

Mit linearen Termen folgt wie üblich

$$\int \exp(-Z^\dagger W Z + A^\dagger Z + Z^\dagger B)[DZ] = \frac{\exp(A^\dagger W^{-1} B)}{\mathrm{sdet}(W)}. \tag{11.18}$$

Aufgaben

(11.1) Bestimme zu $U = \begin{pmatrix} e^{ip} & 0 \\ 0 & e^{iq} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 + k\omega\omega^* & -\omega^* \\ \omega & 1 + k'\omega^*\omega \end{pmatrix}$ das hermitesch Adjungierte $U^\dagger$, wobei $p, q \in \mathcal{A}_+$, $p = p^*$, $q = q^*$, $\omega \in \mathcal{A}_-$.. Für welche reelle Zahlen k und k' ist U superunitär?

(11.2) Man überzeuge sich, dass das Gleiche wie in Aufgabe 1 gilt, wenn man das konjugiert Komplexe und das Adjungierte 1. Art durch das 2. Art ersetzt.

12 Superreelle Matrizen, unitärorthosymplektische Gruppe

12.1 Superreelle Matrizen

Wir haben bisher das konjugiert Komplexe eingeführt und können daher reelle Größen einführen. Es stellt sich die Frage, ob man auch reelle Matrizen $W \in \mathcal{M}(n_1, m_1, n_2, m_2)$ einführen kann. Reelle Matrizen ohne Graßmann-Variable das heißt aus $\mathcal{M}(n_1, 0, n_2, 0)$ sind uns ja geläufig. Die Erweiterung auf $W \in \mathcal{M}(n_1, m_1, n_2, m_2)$ ist aber nicht ganz offensichtlich.

Verwenden wir das konjugiert Komplexe erster Art, so stellt sich wegen (10.2) heraus, dass das Produkt zweier reeller Elemente aus $\mathcal{A}_-$ imaginär ist. Damit haben wir dann aber im Produkt zweier reeller Matrizen nicht verschwindende Imaginärteile. Man kann dies dadurch in Ordnung bringen, dass wir etwa verlangen, dass die Matrixelemente eines der beiden Blöcke α und β in $W = \begin{pmatrix} a & \alpha \\ \beta & b \end{pmatrix}$ imaginär sind und die der anderen drei Blöcke reell. Das Produkt hat dann die gleiche Struktur. Ich will das nicht weiter verfolgen, da ich dafür keine Anwendung kenne.

Bei dem konjugiert Komplexen der zweiten Art besteht dagegen das Problem, dass die Elemente aus $\mathcal{A}_-$ weder reell noch imaginär sein können. Ein Ausweg ergibt sich dadurch, dass man jeweils Paare ξ und $\xi^\times$ in die Blöcke α und β aufnimmt. Die Zuordnung erfolgt am einfachsten mit Hilfe der Matrix G, die wir in (9.15) eingeführt haben. Wir definieren: Eine Matrix $W \in \mathcal{M}(n_1, 2r_1, n_2, 2r_2)$ ist superreell, wenn sie der Bedingung

$$G^{(n_1,2r_1)} W^\times = W G^{(n_2,2r_2)} \tag{12.1}$$

genügt.[4] Offensichtlich sind superreelle Matrizen nur für geradzahlige m_1 und m_2 definiert. Wir betrachten nun genauer die Struktur einer superreellen Matrix. Sie hat die Form

$$W = \begin{pmatrix} .. & .. & .. & .. & .. & .. \\ .. & c & .. & \zeta & \zeta^\times & .. \\ .. & .. & .. & .. & .. & .. \\ .. & \eta & .. & b & d & .. \\ .. & \eta^\times & .. & -d^\times & b^\times & .. \\ .. & .. & .. & .. & .. & .. \end{pmatrix}. \tag{12.2}$$

Dabei sind die Elemente c in der Submatrix a reell. Die Submatrizen α und β bestehen aus Paaren ungerader Elemente, die durch Konjugation aus einander hervorgehen. Die Submatrix b schliesslich setzt sich aus 2×2 Matrizen zusammen, die die Form einer Quaternion haben. Man überzeugt sich nun leicht, dass das Produkt zweier superreeller Matrizen wieder superreell ist. Für obiges W und ein superreelles $V \in \mathcal{M}(n_2, 2r_2, n_3, 2r_3)$ folgt nämlich

$$G^{(n_1,2r_1)}(WV)^\times = G^{(n_1,2r_1)} W^\times V^\times = W G^{(n_2,2r_2)} V^\times = WV G^{(n_3,2r_3)}. \tag{12.3}$$

Insbesondere bilden die superreellen quadratischen Matrizen mit festem n und r eine Algebra.

12.2 Unitärorthosymplektische Gruppe

In Abschnitt 9 hatten wir die orthosymplektische Gruppe eingeführt. Für deren Elemente U galt (9.18) $U^T G U = G$. Für die pseudosuperunitäre Transformation hatten wir in Abschnitt 11 die Bedingung $U^\ddagger g U = g$. Wir betrachten nun die Gruppe, die durch den Durchschnitt beider gegeben ist. Für diese gilt

$$U^{-1} = G^{-1} U^T G = g^{-1} U^\ddagger g. \tag{12.4}$$

Bilden wir vom mittleren und vom rechten Ausdruck das Transponierte zweiter Art und verwenden wir die Beziehungen für G und g, so folgt

$$G g U^\times = U G g. \tag{12.5}$$

[4] Die hier gegebene Definition des Superreellen und die Definition von G in 9.15) weicht von der in [5] ab. Beide Änderungen kompensieren sich.

Für die definite Metrik $g = 1$ heißt das, dass U superreell ist. Diese Transformation heißt unitärorthosymplektisch. Sie beinhaltet im Spezialfall, in dem die ungeraden Elemente der Algebra verschwinden in einem Sektor die (unitär)orthogonale Transfomation (für reelle Matrizen), im anderen die unitärsymplektische Transformation für Quaternionen-Matrizen. An dieser Stelle sieht man, dass diese beiden Transformationen eng miteinander verknüpft sind. Ähnlich sind durch die superunitäre Transformation zwei unitäre Transformationen miteinander verknüpft.

Behält man die indefinite Metrik bei, so bleibt in der Beziehung (12.5) die Metrik g stehen. Eine Matrix U, die (12.5) genügt, können wir als pseudoreell bezeichnen. Es sei noch darauf hingewiesen, dass in diesem Fall zweckmässigerweise G und g kommutieren sollten. Auch die pseudoreellen quadratischen Matrizen (mit fester Metrik g) bilden eine Algebra.

12.3 Superreelle, hermitesche und s-symetrische Matrizen

Hat eine Matrix W zwei der drei folgenden Eigenschaften: a) sie ist superreell, b) sie ist hermitesch zweiter Art, c) GW ist s-symetrisch, dann hat sie auch die dritte Eigenschaft. Dies sieht man folgendermaßen: Die Eigenschaft a) $GW^\times = WG$ ist äquivalent zu

$$W = GW^\times G^{-1}. \tag{12.6}$$

Die Eigenschaft b) $W = W^\ddagger$ ist durch Anwendung der Operation $^\times$ äquivalent zu $W^\times = W^{\times\times T} = \sigma W^T\sigma$ und daraus

$$GW^\times G^{-1} = G^{-1}W^TG. \tag{12.7}$$

Schließlich ist die Eigenschaft c) $GW = (GW)^T\sigma = W^TG$ äquivalent zu

$$W = G^{-1}W^TG. \tag{12.8}$$

Nunmehr sieht man unmittelbar, dass aus zwei der Gleichheiten (12.6) bis (12.8) auch die dritte folgt.

12.4 Gauß-Integral VI

Das Gauss-Integral über ein superreelles $Z \in \mathcal{M}(n, 2r, 1, 0)$ mit einer superreellen hermiteschen Matrix $W \in \mathcal{M}(n, 2r, n, 2r)$ und einem superreellen $A \in \mathcal{M}(n, 2r, 1, 0)$ ergibt sich zu

$$\int \exp(-\frac{1}{2}Z^\ddagger WZ + A^\ddagger Z) = \mathrm{spf}(GW)\exp(\frac{1}{2}A^\ddagger W^{-1}A). \tag{12.9}$$

Man beachte, dass

$$A^\ddagger Z = Z^\ddagger A = A^TGZ = Z^TGA. \tag{12.10}$$

Aufgabe

(12.1) Man zeige, dass die in (9.16) und (11.12) definierten Skalarprodukte für pseudoreelle Vektoren S und T übereinstimmen.

13 Ausblicke

13.1 Anderson-Lokalisierung

Wir haben schon im Abschnitt (3.4) kurz das Problem der Anderson-Lokalisierung erwähnt und erklärt, wie man dieses mit Hilfe von Grassmann-Variablen anfangs formuliert. Es ist hier nicht der Platz die weitere Durchführung im Detail zu bringen. (Siehe [5], vergleiche [3, 4, 15]). Daher nur kurz ein paar Schritte. Wir betrachten wieder ein Tight-binding-Modell auf einem periodischen Gitter und führen an jedem Gitterpunkt n Orbitale $r\alpha$ ein. Der Hamilton-Operator sei

$$H = \frac{1}{\sqrt{n}} \sum_{r\alpha,r'\beta} f_{r\alpha,r'\beta} |r\alpha\rangle\langle r'\beta|. \tag{13.1}$$

Wir führen nun die Green-Funktionen

$$\langle r\alpha|\frac{1}{z_p - H}|r'\beta\rangle = s_p\langle S_p(r\alpha)S_p^*(r'\beta)\rangle = -s_p\langle\zeta_p(r\alpha)\zeta_p^*(r'\beta)\rangle \tag{13.2}$$

mit

$$\begin{aligned}\langle A\rangle &= \int A\exp(-\mathcal{H})[D\Phi] = \int A\exp(-\mathcal{H})\prod_{r\alpha}(d\Re S_p(r\alpha)d\Im S_p(r\alpha)/\pi d\zeta_p(r\alpha)d\zeta_p^*(r\alpha)), &(13.3)\\ \mathcal{H} &= -c/\sqrt{n}\mathrm{str}[\Phi s\Phi^\dagger f] + c\sum_r \mathrm{str}[\Phi(r)\sqrt{s}h(r)\sqrt{s}\Phi^\dagger(r)], &(13.4)\end{aligned}$$

und $\Phi(r\alpha) = (S_1(r\alpha), S_2(r\alpha), \zeta_1(r\alpha), \zeta_2(r\alpha)) \in \mathcal{M}(1,0,2,2)$ ein. Im Moment setze ich $c = 1$. Diese Felder können für mehrere Orbitale $r\alpha$ zusammengesetzt werden zu $\Phi(r) \in \mathcal{M}(n,0,2,2)$ und $\Phi \in \mathcal{M}(Nn,0,2,2)$, wobei N die Anzahl der Gitterpunkte ist. z, s sind die Diagonalmatrizen aus $\mathcal{M}(2,2,2,2)$ mit Diagonalelementen z_1, z_2, z_1, z_2 und s_1, s_2, s_1, s_2. Auch $h \in \mathcal{M}(2,2,2,2)$. Für die Auswertung ist $h(r) = z$ zu setzen. Die Matrix f ist aus $\mathcal{M}(Nn,0,Nn,0)$. Nimmt man eine Gaußsche Verteilung der Matrixelemente f mit Mittelwerten 0 an

$$\overline{f_{r\alpha,r'\beta}f_{r''\gamma,r'''\delta}} = \delta_{r,r'''}\delta_{r',r''}\delta_{\alpha,\delta}\delta_{\beta,\gamma}M_{r,r'}, \tag{13.5}$$

dann ergibt die Mittelung über die Eigenwerte

$$\overline{\exp(-\mathcal{H})} = \exp\left(-c\sum_r \mathrm{str}[\Phi(r)\sqrt{s}h(r)\sqrt{s}\Phi^\dagger(r)] + \frac{c}{2n}\sum_{r,r'} M_{r,r'}\mathrm{str}[\Phi(r)s\Phi^\dagger(r')\Phi(r')\Phi^\dagger(r)]\right). \tag{13.6}$$

Anschließend führt man die "zusammengesetzten" Variablen $Q(r) \in \mathcal{M}(2,2,2,2)$ ein mit der Identität

$$\int \exp(-\frac{cn}{2}\sum_{r,r'} w_{r,r'}\mathrm{str}[(Q(r)+\gamma(r))(Q(r')+\gamma(r'))][DQ] = 1 \tag{13.7}$$

mit

$$[DQ] = \prod_{p,r}(2\pi^2)^{1/2}(da_p(r)db_p(r)d\zeta_p(r)d\zeta_p^*(r)) \tag{13.8}$$

und

$$Q = \begin{pmatrix} a_1 & b_1 + ib_2 & \zeta_1 & \zeta_2 \\ b_1 - ib_2 & a_2 & \zeta_3 & \zeta_4 \\ \zeta_1^* & \zeta_3^* & a_3 & b_3 + ib_4 \\ \zeta_2^* & \zeta_4^* & b_3 - ib_4 & a_4 \end{pmatrix}. \tag{13.9}$$

Q wäre hermitesch für reelle a und b. Um aber konvergente Integrale zu erhalten, muss man a_3, a_4, b_3, b_4 imaginär wählen. Tatsächlich müssen auch die Integrationswege für a_1, a_2, b_1, b_2 modifiziert werden, damit auch die anschließenden Φ-Integrale konvergieren [14]. Mit

$$\gamma(r) = -n^{-1}\sum_{r'} M_{r,r'}\sqrt{s}\Phi^\dagger(r')\Phi(r')\sqrt{s} \tag{13.10}$$

und w als der inversen Matrix von M erhält man

$$\overline{\exp(-\mathcal{H})} = \int \exp\left(-\frac{nc}{2}\sum w_{r,r'}\mathrm{str}[Q(r)Q(r')] + c\,\mathrm{str}[\Phi(r)\sqrt{s}(Q(r)-h(r))\sqrt{s}\Phi^\dagger(r)]\right)[DQ] \quad (13.11)$$

Führt man nun die Φ-Integration durch, so bleibt

$$Z(h,n) = \int \exp(-L)[DQ], \quad L = \frac{nc}{2}\sum_{r,r'} w_{r,r'}\mathrm{str}[Q(r)Q(r')] + nc\sum_r \mathrm{str}[\ln(h(r)-Q(r)]. \quad (13.12)$$

Durch Differenzieren nach h ist es nun möglich, Mittelwerte von Green-Funktionen und deren Produkte darzustellen. Für große n wählt man hierzu die Sattelpunktslösung für Q und entwickelt um diese. Wählt man nur einen Gitterpunkt (Gaußsches unitäres Ensemble), so hat man nur eine Matrix Q und kann das Verhalten genauer untersuchen, siehe z. B. [15].

Man kann nun aber an Stelle von $\Phi(r) \in \mathcal{M}(n,0,2,2)$ die Wahl $\Phi(r) \in \mathcal{M}(0,n,2,2)$ und entsprechend $\Phi \in \mathcal{M}(0,Nn,2,2)$, $f \in \mathcal{M}(0,Nn,0,Nn)$ treffen. Bei der Rechnung benötigt man aus Konvergenzgründen jetzt $c=-1$. Auch ist die Behandlung von a_1,a_2,b_1,b_2 gegen die von a_3,a_4,b_3,b_4 auszutauschen. Bei der Auswertung von Z hat man nun den gleichen Sattelpunkt für $c=+1$ und $c=-1$. Man findet, dass in einer formalen Entwicklung von Z nach Potenzen von $1/n$ die Beziehung

$$Z_{c=1}(h,n) = Z_{c=-1}(h,-n) \quad (13.13)$$

gilt. Daraus folgt für die gemittelte Green-Funktion

$$G(r,r,z_p,n) = G(r,r,z_p,-n). \quad (13.14)$$

Ähnliche Beziehungen gelten für Zweiteilchen-Green-Funktionen. Es treten daher im unitären Fall nur gerade Potenzen in n auf.

Noch interessanter sind die Ergebnisse für zeitumkehrinvariante Systeme. Man kann einerseits ein zeitumkehrinvariantes spinunabhängiges Potential einführen, dessen Matrixelemente f reell sind (für $N=1$ das Gaußsche orthogonale Ensemble)

$$f^*_{r\alpha,r'\beta} = f_{r\alpha,r'\beta} \quad (13.15)$$

mit einer Gauß-Verteilung, die

$$\overline{f_{r\alpha,r'\beta}f_{r''\gamma,r'''\delta}} = (\delta_{r,r'''}\delta_{r',r''}\delta_{\alpha,\delta}\delta_{\beta,\gamma} + \delta_{r,r''}\delta_{r',r'''}\delta_{\alpha,\gamma}\delta_{\beta,\delta})M_{r,r'}, \quad (13.16)$$

genügt. Man führt dazu die Matrix $f \in \mathcal{M}(Nn,0,Nn,0)$ ein. Wir arbeiten hier mit dem Adjungierten zweiter Art. f ist superreell und Φ wird ebenfalls superreell eingeführt. Andererseits betrachtet man ein zeitumkehrinvariantes spinabhängiges Potential (Spin-Bahn-Kopplung), das

$$f_{r\alpha\sigma,r'\beta\sigma'} = \sigma\sigma' f^*_{r\alpha-\sigma,r'\beta-\sigma'} \quad (13.17)$$

genügen muss. Auf Grund dieser Beziehung hat man für $f \in \mathcal{M}(0,Nn,0,Nn)$ ebenfalls eine superreelle Matrix, denn die 2×2 Matrixelemente für festes r,α,r',β haben Quaterninogestalt. (α läuft hier nur von 1 bis $n/2$). Für die Gauss-Verteilung setzen wir an

$$\begin{aligned}&\overline{f_{r\alpha\sigma,r'\beta\sigma'}f_{r''\gamma\sigma'',r'''\delta\sigma'''}}\\ &= (\delta_{r,r'''}\delta_{r',r''}\delta_{\alpha,\delta}\delta_{\beta,\gamma}\delta_{\sigma,\sigma'''}\delta_{\sigma',\sigma''} + \delta_{r,r''}\delta_{r',r'''}\delta_{\alpha,\gamma}\delta_{\beta,\delta}\sigma\sigma'\delta_{\sigma,-\sigma''}\delta_{sigma',-\sigma'''})M_{r,r'}. \quad (13.18)\end{aligned}$$

(Für $N=1$ ist das das Gaußsche symplektische Ensemble.) In diesen beiden zeitumkehrinvarianten Systemen verwenden wir jeweils das Adjungierte zweiter Art. Beide sind nun durch

$$Z_{orth}(h,n) = Z_{sympl}(h,-n) \quad (13.19)$$

in einer asymptotischen Entwicklung miteinander verknüpft sind. Man erhält also aus einer $1/n$-Entwicklung des einen Systems durch Vorzeichenwechsel die des anderen Systems. Damit ist eine Symmetriebeziehung, die zuerst von Jüngling und Oppermann [16] diagrammatisch gefunden wurde, mit Hilfe von Graßmann-Variablen gezeigt worden.

13.2 Dimensionelle Reduktion

Wir haben bei der Rechnung für die Anderson-Lokalisierung zwei verschiedene Energien z eingeführt. Niemand hindert uns daran, noch mehr einzuführen. Differenzieren wir nicht nach den entsprechenden z-Werten, so sollte das keinen Einfluß auf das Ergebnis haben. Tatsächlich ist L für $h = z$ invariant gegen UPL(1,1) Rotationen. Man kann zeigen, dass unter dieser Bedingung die Integration über alle Variablen, die von dieser Rotation betroffen sind, den Wert an einem rotationsinvarianten Punkt ergibt. Siehe [17] und die dort zitierte Literatur.

Eine Konsequenz ist, dass bei der Entwicklung von kritischen Exponenten für eine ϕ^4-Theorie in $4 - \epsilon$ Dimensionen stets der Faktor $n + 2$ in den Exponenten für ein n-komponentiges Feld auftritt (siehe z. B. [2]). An Stelle von $\phi \in \mathcal{M}(n, 0, 1, 0)$ kann man auch mit $\phi \in \mathcal{M}(n + 2r, 2r, 1, 0)$ rechnen. Für $n = -2, r = 1$ erhält man dann $\phi^2 = \bar{\theta}\theta$ und ϕ^4 verschwindet, da θ und $\bar{\theta}$ Grassmann-Variable sind. Man hat es also für $n = -2$ mit einer freien Theorie mit trivialen Exponenten zu tun.

Es hat weiterhin eine wichtige Konsequenz für bestimmte supersymmetrische Theorien. Darunter versteht man Theorien, bei denen man außer den üblichen Raum-Zeit-Koordinaten noch Graßmann-wertige Koordinaten θ und $\bar{\theta}$ hat. Das Feld Φ schreibt man dann etwa

$$\Phi(x, \bar{\theta}, \theta) = f(x) + \bar{\psi}(x)\theta + \bar{\theta}\psi(x) + \bar{\theta}g(x)\theta. \tag{13.20}$$

Ist nun die Wechselwirkung invariant bezüglich UPL(d,2) der Koordinaten $x, \bar{\theta}, \theta$, dann reduziert sich das Problem auf ein $(d - 2)$-dimensionales. Dies passiert näherungsweise beim Phasenübergang eines Ferromagneten in hohen Dimensionen [18], sowie für die Zustandsdichte eines zweidimensionalen Elektronengases in einem starken Magnetfeld und im Zufallspotential, wenn man nur das unterste Landau-Niveau betrachtet [19]. Eine kurze Zusammenfassung findet sich in [20]. Es muss kaum betont werden, dass Graßmann-Variable neben all den anderen Anwendungen, die wir hier betrachtet haben, vor allem für fermionische Pfadintegrale und für supersymmetrische Theorien von großer Bedeutung sind. Eine Anwendung, die z. B. beim Problem des Phasenübergangs im stochastischen Magnetfeld aber auch bei anderen Problemen eine wichtige Rolle spielt, ist, dass man Nebenbedingungen über Grassmann-Variable einführen kann. Das Schema ist das folgende: Auszuwerten ist ein Integral

$$Z = \int f(\phi)P(h)[Dh], \tag{13.21}$$

wobei $\phi \in \mathcal{M}(N, 0, 1, 0)$ und $h \in \mathcal{M}(N, 0, 1, 0)$ den Nebenbedingungen

$$h_i = g_i(\phi). \tag{13.22}$$

genügt. Man substituiert dann

$$Z = \int f(\phi)\det(\frac{\partial g}{\partial \phi})P(g(\phi))[D\phi] \tag{13.23}$$

und formt um

$$Z = \int f(\phi)\exp(-\theta^\dagger \frac{\partial g}{\partial \phi}\theta)P(g(\phi))[D\phi D\theta^* D\theta] \tag{13.24}$$

mit $\theta \in \mathcal{M}(N, 0, 0, 1)$.

Literatur

[1] F. A. Berezin, Introduction to Superanalysis, Reidel Dordrecht 1987

[2] J. Zinn-Justin, Quantum Field Theory and Critical Phenomena, Clarendon Press Oxford 1993

[3] K. B. Efetov, Adv. Phys. 32 (1983) 53

[4] J.J.M. Verbaarschot, H. A. Weidenmüller, M. R. Zirnbauer, Phys. Repts. 129 (1985) 367

[5] F. Wegner, Z. Phys. B 49 (1983) 297

[6] C. Itzykson, J-B. Zuber, Quantum Field Theory, Mc-Graw Hill 1980

[7] H. Kleinert, Path Integrals in Quantum Mechanics, Statistics and Polymer Physics, World Scientific Singapur 1990; Pfadintegrale in der Quantenmechanik, Statistik und Polymerphysik, BI Wissenschaftsverlag Mannheim 1993

[8] V. N. Popov, Functional Integrals in quantum field theory and statistical physics, Reidel 1983 Dordrecht

[9] P. W. Kasteleyn, Physica 27 (1961) 1209; J. Math. Phys. 4 (1963) 287

[10] B. McCoy, T. T. Wu, The Two-Dimensional Ising Model, Harvard 1973

[11] S. Samuel, J. Math. Phys. 21 (1980) 2806

[12] M. E. Fisher, J. Math. Phys. 7 (1966) 1776

[13] V. Rittenberg, M. Scheunert, J. Math. Phys. 19 (1978) 709

[14] L. Schäfer, F. Wegner, Z. Physik B 38 (1980) 113

[15] J. J. M. Verbaarschot, M. R. Zirnbauer, J. Phys. A 17 (1985) 1093

[16] K. Jüngling, R. Oppermann, Phys. Lett. 76 A (1980) 449; Z. Physik B 38 (1980) 93

[17] F. Constantinescu, H. F. de Groote, J. Math. Phys. 30 (1989) 981

[18] G. Parisi, N. Sourlas, Phys. Rev. Lett. 43 (1979) 744

[19] E. Brezin, D.J. Gross, C. Itzykson, Nucl. Phys. B 235 (1984) 24

[20] F. Wegner, in Supersymmetry, ed. K. Dietz, R. Flume, G. v. Gehlen, V. Rittenberg, NATO ASI Series B: Vol. 125 (1985) 697