

Vorlesung 'Statistische Mechanik' (Mathematische Physik II)

Andreas Knauf* Ruedi Seiler†

Wintersemester 2006/2007

Zusammenfassung

Vorlesungsbegleitendes Skript. Dieser zweite Teil der dreiteiligen, vierstündigen Vorlesung über Mathematische Physik ist unabhängig von Teil I (Klassische Mechanik) und Teil III (Quantenmechanik).

In diesem Teil wird eine Einführung in die Statistische Mechanik gegeben. Für klassische und quantenmechanische Systeme wird der Begriff des Phasenübergangs definiert, und für konkrete Spinsysteme Existenz bzw. Nichtexistenz von Phasenübergängen bewiesen.

Anregungen und Kritik sind willkommen!

Inhaltsverzeichnis

1	Einleitung	4
2	Wahrscheinlichkeitstheorie und Gibbsmaß	8
2.1	Der wiederholte Münzwurf	8
2.2	Gibbsmaß endlicher Spinsysteme	17
2.3	Allgemeine Wahrscheinlichkeitstheorie	20
2.4	Das Curie–Weiss–Modell	24
3	Quantenstatistik	28
3.1	Die Observablen-Algebra	28
3.2	Quantenmechanische Zustände	31
3.3	Der quantenmechanische harmonische Oszillator	33

*Mathematisches Institut, Universität Erlangen-Nürnberg, Bismarckstr. 1 $\frac{1}{2}$, D–91054 Erlangen, Germany. e-mail: knauf@mi.uni-erlangen.de

†Technische Universität Berlin, Fachbereich Mathematik, Str. des 17. Juni 136, D–10623 Berlin

4	Entropie	35
4.1	Geometrie der Zustände	36
4.2	Entropie eines Zustandes	37
4.3	Die statistischen Ensembles	40
5	Klassische Spinsysteme	44
5.1	Klassische Spins	45
5.2	Endliche Spinsysteme	46
5.3	Der Konfigurationsraum eines unendlichen Spinsystems	49
5.4	Die Wechselwirkung eines unendlichen Spinsystems	52
5.5	Wahrscheinlichkeitsmaße für unendliche Spinsysteme	56
5.6	Mikroskopische und Makroskopische Observable	57
6	Thermodynamischer Limes der Freien Energie	59
6.1	Bedeutung der Freien Energie	60
6.2	Der van-Hove-Limes	62
6.3	Limes für kubische Gebiete	64
6.4	Limes für beliebige Gebiete	67
6.5	Die Ising-Spinkette	71
7	Phasenübergänge und asymptotische Gibbsmaße	74
7.1	Parameterabhängigkeit der Freien Energie	75
7.2	Freie Energie von Spinketten	78
	7.2.1 Wechselwirkung endlicher Reichweite	78
	7.2.2 Wechselwirkung unendlicher Reichweite	79
7.3	Definition asymptotischer Gibbsmaße	82
7.4	Existenz und Struktur asymptotischer Gibbsmaße	86
8	Existenz von Phasenübergängen	93
8.1	Das Peierls-Argument	94
8.2	Korrelationsungleichungen	102
8.3	3-D Isingmodell: Nicht translationsinvariante Phasen	107
9	Abwesenheit von Phasenübergängen	111
9.1	Analytizität der Freien Energie	112
9.2	Eindeutiges Gibbsmaß bei hohen Temperaturen	122
9.3	Die Hochtemperaturentwicklung	126
10	Das zweidimensionale Isingmodell	129
10.1	Die Stern-Dreiecks-Relation	129
10.2	Die kombinatorische Lösung	131

11 Der thermodynamische Limes in der Quantenmechanik	144
12 Andere Anwendungen des Thermodynamischen Formalismus	149
12.1 Iterierte Abbildungen	150
12.2 Streuung an drei Scheiben	154
13 Numerik	158
13.1 Monte–Carlo–Simulation von Markovketten	159
13.2 Der Metropolis–Algorithmus	161
13.3 Nicht lokale Methoden	164
14 Dynamik und Statistische Mechanik	169
14.1 Zeitinvarianz des Kanonischen Gibbsmaßes	169
14.2 Kanonisches und Mikrokanonisches Ensemble	172
14.3 Die Ergodenhypothese	174
14.4 Zeitskalen von Vielteilchensystemen	177
14.5 Beispiel: Das Ideale Gas	179
15 Quantenmechanische ideale Gase	184
15.1 Zweitquantisierung	184
15.2 Das ideale Gas	188
15.3 Das ideale Fermigas	191
15.4 Das ideale Bosegas	193
Anhänge	197
A Topologie und Metrik	197
B Fouriertransformation auf abelschen Gruppen	200
C Ordnung der Zustände	203
D Mean-Field-Theorie	206
E Markov–Ketten	209
F Der Satz von Frobenius und Perron	215
Literatur	218
Index	222

1 Einleitung

”Die Natur macht keine Sprünge” - so lautet ein auf die Antike zurückgehendes Vorurteil. Kleine Veränderungen der äußeren Bedingungen sollen also zu kleinen Veränderungen des Zustandes eines physikalischen Systems führen.

Diese Beobachtung lässt sich an unzähligen Beispielen belegen, und dennoch kennen wir alle *ein* Gegenbeispiel.

Erhitzen wir Wasser, so bleibt es bis $100\text{ }^{\circ}\text{C}$ flüssig und wird dann gasförmig. Kühlen wir es ab, so wird es bei $0\text{ }^{\circ}\text{C}$ zu Eis. Diese Änderungen des Zustandes sind so sprunghaft, dass sie sich zur Definition der (Celsius-)Temperatur-Skala eignen. Die Dichte von Wasser beispielsweise springt bei $100\text{ }^{\circ}\text{C}$ auf $1/1600$. Um dieses Verhalten von H_2O besser zu verstehen, können wir zunächst verschiedene Größen wie Dichte, Wärmekapazität oder Kompressibilität in Abhängigkeit von Temperatur und Druck messen und danach versuchen, funktionale Abhängigkeiten zwischen diesen (makroskopischen) Größen zu finden. Dies ist die Aufgabe der *Thermodynamik*.

Wir können aber auch versuchen, die Druck- und Temperaturabhängigkeit dieser Größen aus der Form der Wechselwirkung zwischen den H_2O -Molekülen abzuleiten. Die Lösung dieses (schwierigen) Problems ist Aufgabe der *Statistischen Mechanik*.

Es liegt auf der Hand, dass im Lauf einer solchen Untersuchung auch mikroskopische Größen, z. B. mittlere Abstände zwischen den Molekülen, in ihrer Abhängigkeit von Temperatur und Druck untersucht werden müssen, denn offensichtlich hängt beispielsweise die (makroskopische) Dichte vom (mikroskopischen) Molekülabstand ab.

In einem Glas Wasser befinden sich größenordnungsmäßig 10^{23} Moleküle. Kennen wir den Zustand dieser Moleküle zu einem bestimmten Zeitpunkt, so müssen wir die Schrödingergleichung bzw. newtonsche Gleichung all dieser Moleküle lösen, um den genauen Zustand zu einem späteren Zeitpunkt zu berechnen. Beides, die Messung des aktuellen Zustandes von 10^{23} Molekülen wie auch die Lösung einer Differentialgleichung für diese 10^{23} Teilchen, ist ein hoffnungslos schwieriges Unterfangen. Würde die Statistische Mechanik von der Lösung dieser Probleme abhängen, würde sie als Theorie gar nicht existieren.

Erfreulicherweise hat sich folgende Annahme als außerordentlich erfolgreich herausgestellt: Um die interessierenden thermodynamischen Größen wie Dichte oder Wärmekapazität zu berechnen, benötigen wir nicht die Kenntnis (klassisch) der Orte und Geschwindigkeiten aller 10^{23} Moleküle, sondern müssen nur einen Gleichgewichtszustand berechnen, der von wenigen äußeren Parametern (in unserem Fall: Druck und Temperatur) abhängt.

Im Rahmen der Klassischen Physik ist dieser so genannte Gibbszustand bei

inverser Temperatur

$$\beta > 0 \quad , \quad T = 1/\beta \text{ Temperatur}$$

(für endliche Teilchenzahl n) das Wahrscheinlichkeitsmaß mit Dichte

$$\frac{\exp(-\beta H(\omega))}{\int_{\Omega} \exp(-\beta H) d\lambda} \quad (\omega \in \Omega)$$

auf dem Phasenraum Ω mit Maß λ . Dabei bezeichnet $H : \Omega \rightarrow \mathbb{R}$ die Gesamtenergie des Systems. Oft ist $\Omega = \mathbb{R}_p^{3n} \times \mathbb{R}_q^{3n}$ der Raum der Impulse p_i und Orte q_i , $i = 1, \dots, n$ der n Teilchen, und λ das Lebesguemaß.

Allgemein wird durch Angabe einer Energiefunktion, d. h. der Wechselwirkung zwischen den Teilchen, ein sog. *Modell* der statistischen Mechanik definiert.

- Die erste Frage, die sich uns stellen wird, ist natürlich die nach der *Rechtfertigung* dieses Ansatzes.
- Die zweite Frage ergibt sich, wenn man zu sehr großen Teilchenzahlen ($n \sim 10^{23}$) übergeht. Wir erwarten intuitiv, dass viele Messgrößen (wie Dichte, spezifische Wärme etc.) nicht stark mit n variieren, wenn n groß genug ist: Die Dichte von Wasser in einem Glas ist von der Dichte in einem Schwimmbecken nur unwesentlich verschieden. Wir würden also gerne zum so genannten *thermodynamischen Limes* $n \rightarrow \infty$ übergehen.

Allerdings ist im Rahmen der mathematischen Physik zu zeigen, dass dieser Limes in einem geeigneten Sinn existiert. Diese Fragestellung ist nicht rein akademisch, wie das folgende Beispiel zeigt. Wir betrachten n Teilchen, die nun aber nicht nur elektrostatisch, sondern auch gravitativ wechselwirken. Wird n groß, so erwarten wir, dass sich die Materie zu einem Planeten oder Stern zusammenballt. Wird n noch größer, wird dieser Stern unter dem Einfluss der Schwerkraft zu einem schwarzen Loch kollabieren. Der thermodynamische Limes existiert hier nicht.

- Eine dritte Frage ist die nach *Phasenübergängen* wie beim Wasser. Das oben definierte Gibbsmaß hängt offensichtlich (für $T > 0$) analytisch von T ab. Es ist also nicht zu sehen, wie Unstetigkeiten von Größen wie der Dichte in Abhängigkeit von der Temperatur zustande kommen können.

Tatsächlich besitzen endliche Systeme keinen Phasenübergang. Nur im thermodynamischen Limes unendlicher Teilchenzahl können wir das Auftreten von Phasenübergängen erwarten. Dies ist natürlich ein wesentlicher Grund für das Interesse am thermodynamischen Limes.

Ein Einwand ist hier am Platz: Die Teilchenzahl eines physikalischen Systems ist durch die Gesamtzahl der Baryonen im Universum beschränkt, und

diese ist endlich (kleiner als 10^{100}). Warum beobachten wir dann überhaupt Phasenübergänge? Die Antwort ist, dass wir durch Messungen, die ja nur eine endliche Genauigkeit besitzen, gar nicht entscheiden können, ob eine Größe wie die Dichte eine Unstetigkeit besitzt oder nur extrem schnell mit der Temperatur variiert.

- Fast alle Festkörper besitzen verschiedene Phasen. Ein wichtiges Beispiel ist das der Ferromagneten wie Eisen. Bringen wir Eisen in ein starkes äußeres Magnetfeld, so bleibt es auch nach Abschalten des äußeren Feldes magnetisch, weil sich die einzelnen atomaren Elementarmagnete im Festkörper in Magnetfeldrichtung ausgerichtet haben und nun gegenseitig stabilisieren. Der Betrag dieser Magnetisierung M hängt von der Temperatur T des Eisens ab, während die Richtung beliebig ist und nur von dem zeitweise angelegten äußeren Feld abhängt.

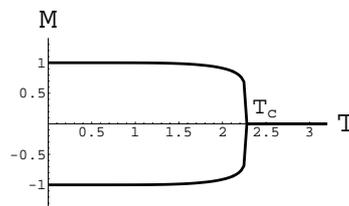


Abbildung 1.1: Spontane Magnetisierung

Es ergibt sich qualitativ das in Abb. 1.1 dargestellte Bild¹:

Unterhalb der sog. *Curie-Temperatur* T_c kann die Magnetisierung nach oben oder nach unten zeigen, sodass ein Phasenübergang zwischen diesen zwei unterschiedlichen Phasen existiert. Oberhalb der Curie-Temperatur ist das Eisen entmagnetisiert und es existiert nur noch eine Phase.

Eine genaue Untersuchung zeigt, dass der Phasenübergang des Eisens von einem anderen Typ ist als der von H_2O , da beim Umklappen der Magnetisierung im Gegensatz zum Kondensieren von Wasserdampf keine innere Energie frei wird (wir bemerken diese freiwerdende innere Energie schmerzlich, wenn wir uns an Wasserdampf verbrühen).

Allgemein stellt sich die Frage (Nummer 4), ob die Vielzahl der empirisch beobachtbaren Phasenübergänge jeweils ganz getrennt untersucht werden müssen, oder ob zumindest einige Familien oder *Grundtypen* existieren. Wir ahnen schon, dass eine Besonderheit des Magneten darin besteht, dass die verschiedenen Phasen durch Brechen einer räumlichen Symmetrie zustande kommen.

Statistische Mechanik ist keine einfache Disziplin, vor allem, wenn die Aussagen mathematisch deduziert werden sollen. Um uns das Leben nicht zu schwer zu

¹Die dargestellten Graphen sind die der spontanen Magnetisierung des sog. zweidimensionalen Isingmodells, siehe Kapitel 10.

machen, werden wir uns im Wesentlichen auf so genannte Spinsysteme und verwandte Systeme beschränken, bei denen die einzelnen Teilchen auf einem Gitter (Kristall) sitzen. Viele mathematische Probleme wie das des thermodynamischen Limes sind hier einfacher zu lösen. Doch selbst für diese Fälle ist die explizite Berechnung der interessierenden Messgrößen nur in Ausnahmefällen, den so genannten integrablen Modellen möglich.

Wir werden integrable Modelle wie das Isingmodell in 2 Dimensionen behandeln. Wir wollen aber auch allgemeiner gültige Aussagen wie die der Abwesenheit von Phasenübergängen bei hohen Temperaturen ableiten.

- Mathematisch gesehen fußt die klassische Statistische Mechanik auf der Wahrscheinlichkeitstheorie. Aber (Problem Nr. 5): Worauf basiert die *Quantenstatistische Mechanik*? Und wie kommt es, dass wir in unserer makroskopischen Welt Quanteneffekte kaum beobachten können?
- Ein letzter in dieser Vorlesung behandelter Problemkreis betrifft das Stichwort "*thermodynamischer Formalismus*". Wir werden im Lauf des Semesters diesen Formalismus, d. h. die Techniken und Begriffsbildungen der Statistischen Mechanik, entwickeln. Es stellt sich nun heraus, dass dieser Formalismus auch auf ganz andere Fragen anwendbar ist, z. B. lassen sich mit seiner Hilfe bestimmte chaotische dynamische Systeme mit wenigen (z. B. zwei) Freiheitsgraden beschreiben.

Voraussetzungen: Alles, was über den Stoff der Einführungsvorlesungen in die Lineare Algebra und die Analysis hinausgeht, wird in der Vorlesung eingeführt. Insbesondere ist diese Vorlesung unabhängig vom Teil I der 'Mathematischen Physik' (Klassische Mechanik). Kenntnisse in Elementarer Stochastik sind allerdings hilfreich.

Danksagung Die 1. Version dieser Skripte zum Vorlesungszyklus "Mathematische Physik" ist in der AG Mathematische Physik am FB Mathematik der TU Berlin entstanden.

Ich danke Tanja Dierkes, Konstantin Gerl, Johannes Singer und Stephan Weis, die viele Fehler im Manuskript fanden, und Frau I. Moch, die in detektivischer Arbeit meine Handschrift entzifferte und diese Skripte schrieb. A.K.

2 Wahrscheinlichkeitstheorie und Gibbsmaß

2.1 Der wiederholte Münzwurf	8
2.2 Gibbsmaß endlicher Spinsysteme	17
2.3 Allgemeine Wahrscheinlichkeitstheorie	20
2.4 Das Curie–Weiss–Modell	24

Da die klassische Statistische Mechanik auf Wahrscheinlichkeitstheorie basiert, wollen wir mit einigen Bemerkungen zu dieser beginnen.

Wahrscheinlichkeitstheorie klärt nicht den heuristischen Begriff des zufälligen Ereignisses, sondern sie formalisiert ihn. Sie ermöglicht damit die Berechnung der Wahrscheinlichkeiten zusammengesetzter Ereignisse aus den Wahrscheinlichkeiten von Elementarereignissen sowie die Untersuchung von Limiten.

2.1 Der wiederholte Münzwurf

Betrachten wir das *Beispiel* des wiederholten Münzwurfes. Das Ergebnis eines Münzwurfes liefert entweder das Elementarereignis "Kopf" oder das Elementarereignis "Zahl". Wir wissen nicht, welches Ergebnis ein einzelner Münzwurf liefern wird, stellen aber empirisch fest, dass, wenn bei n Würfeln k -mal das Elementarereignis "Kopf" eintritt, der Quotient k/n für $n \rightarrow \infty$ gegen einen festen Wert $p_0 \in [0, 1]$ konvergiert. Ist der Münzwurf *ideal* (die Münze nicht verbogen, "vernünftig" geworfen etc.), so wird $p_0 = \frac{1}{2}$ sein. Wir betrachten p_0 als die Wahrscheinlichkeit des Elementarereignisses "Kopf". Die Wahrscheinlichkeitstheorie versucht nun nicht, den Wert von p_0 irgendwie zu erklären. Stattdessen werden (unter Zusatzannahmen wie der Unabhängigkeit der Würfe voneinander) gewisse Voraussagen möglich.

Stellen wir uns vor, dass zwei Personen miteinander spielen. Katharina tippt auf "Kopf", Zorro auf "Zahl". Katharina gewinnt einen Euro bei "Kopf" und verliert einen bei "Zahl". Wieviel wird Katharina nach n Würfeln durchschnittlich gewonnen haben? Wir formalisieren.

- Für *einen* Münzwurf ist

$$\Omega := E \quad \text{mit} \quad E := \{\text{Kopf}, \text{Zahl}\}$$

der Raum der Elementarereignisse, die Wahrscheinlichkeit

$$p(\text{Kopf}) := p_0 \quad , \quad p(\text{Zahl}) = q_0 := 1 - p_0, \quad (2.1)$$

wobei $p : \Omega \rightarrow [0, 1]$, $\sum_{\omega \in \Omega} p(\omega) = 1$ die Wahrscheinlichkeiten der Elementarereignisse angibt.

- Bei n Münzwürfen ist der Raum der möglichen Ausgänge gegeben durch das n -fache kartesische Produkt.

$$\Omega := E^n := \underbrace{E \times \dots \times E}_{n\text{-mal}},$$

und $\omega \in \Omega$ lässt sich als $\omega = (\omega_1, \dots, \omega_n)$ schreiben.

Wir müssen festlegen, wie wahrscheinlich ω ist, also wieder eine Funktion $p : \Omega \rightarrow [0, 1]$, $\sum_{\omega \in \Omega} p(\omega) = 1$ bestimmen. Wir kennen die Wahrscheinlichkeiten (2.1) für einen einzelnen Münzwurf. Wir setzen

$$p(\omega) := p_0^{k_n(\omega)} q_0^{n-k_n(\omega)},$$

mit

$$k_n : \Omega \rightarrow \mathbb{N}_0 \quad , \quad k_n(\omega) = |\{i \in \{1, \dots, n\} \mid \omega_i = \text{Kopf}\}|.$$

Bei dieser Definition sind wir davon ausgegangen, dass die n Münzwürfe voneinander unabhängig sind, und sich daher die Wahrscheinlichkeiten ihrer Ergebnisse multiplizieren. p fixiert das Wahrscheinlichkeitsmaß \mathbb{P}_n auf Ω :

$$\mathbb{P}_n(E) := \sum_{\omega \in E} p(\omega) \quad (E \subseteq \Omega).$$

2.1 Bemerkung Zur Unabhängigkeit der Münzwürfe: Dies ist eine empirisch untermauerte Annahme. Viele Spieler glauben allerdings nicht an sie, sondern sagen etwa: "Jetzt ist sechsmal hintereinander 'Kopf' gekommen. Nach dem Gesetz der großen Zahlen ist wahrscheinlich, dass das nächste Mal 'Zahl' fällt." Ob diese Leute Recht haben, lässt sich nur empirisch feststellen (allerdings deutet alles darauf hin, dass sie Unrecht haben). Auf jeden Fall haben sie Unrecht, wenn sie mit dem wahrscheinlichkeitstheoretischen Gesetz der großen Zahlen argumentieren (siehe Korollar 2.2)

- Die Wahrscheinlichkeit, dass Katharina beim i -ten Wurf gewinnt, ist also p_0 . Wir betrachten die Funktionen

$$f_i : \Omega \rightarrow \{-1, 1\} \quad , \quad f_i(\omega) := \begin{cases} 1 & \omega_i = \text{Kopf} \\ -1 & \omega_i = \text{Zahl} \end{cases} \quad (i = 1, \dots, n),$$

und die Funktion

$$F_n : \Omega \rightarrow \mathbb{Z} \quad , \quad F_n := \sum_{i=1}^n f_i. \quad (2.2)$$

$F_n(\omega)$ ist der Gesamtgewinn von Katharina für die Folge $\omega = (\omega_1, \dots, \omega_n)$ von Münzwürfen. Es gilt $F_n = k_n - (n - k_n) = 2k_n - n$.

- Was ist der Erwartungswert $\mathbb{E}(F_n) := \sum_{\omega \in \Omega} F_n(\omega) \cdot p(\omega)$ des Gewinns von Katharina?

Ein einfaches Argument führt zum richtigen Ergebnis: Sie wird durchschnittlich $n \cdot p_0$ -mal gewinnen und $n \cdot q_0$ -mal verlieren, also $n(p_0 - q_0)$ Euros Gewinn erwarten können.

Die formale Rechnung basiert auf folgender Gleichung:

$$\begin{aligned} \mathbb{E}(k_n) &= \sum_{L=0}^n L \cdot \binom{n}{L} p_0^L q_0^{n-L} = p_0 \cdot \frac{\partial}{\partial p_0} (p_0 + q_0)^n = np_0(p_0 + q_0)^{n-1} \\ &= np_0, \end{aligned} \quad (2.3)$$

da nach der binomischen Formel $\sum_{L=0}^n \binom{n}{L} p_0^L q_0^{n-L} = (p_0 + q_0)^n$ gilt. Es folgt

$$\mathbb{E}(F_n) = \mathbb{E}(2k_n - n) = 2\mathbb{E}(k_n) - n = n(p_0 - q_0).$$

- In der Wahrscheinlichkeitstheorie spielt der Begriff der *Varianz* einer Zufallsgröße wie F_n eine Rolle:

$$\begin{aligned} \mathbb{V}(F_n) &:= \mathbb{E}((F_n - \mathbb{E}(F_n))^2) = \mathbb{E}(F_n^2) - 2\mathbb{E}(F_n)\mathbb{E}(F_n) + (\mathbb{E}(F_n))^2 \\ &= \mathbb{E}(F_n^2) - (\mathbb{E}(F_n))^2. \end{aligned}$$

Wir berechnen $\mathbb{V}(F_n) = 4np_0q_0$, indem wir zunächst

$$\begin{aligned} \mathbb{E}(k_n^2) &= \sum_{L=0}^n L^2 \binom{n}{L} p_0^L q_0^{n-L} = p_0 \frac{\partial}{\partial p_0} p_0 \frac{\partial}{\partial p_0} (p_0 + q_0)^n \\ &= p_0 \frac{\partial}{\partial p_0} np_0(p_0 + q_0)^{n-1} = n(n-1)p_0^2 + np_0 \end{aligned}$$

berechnen, daraus

$$\mathbb{V}(k_n) = \mathbb{E}(k_n^2) - (\mathbb{E}(k_n))^2 = n(p_0 - p_0^2) = np_0q_0 \quad (2.4)$$

folgern und wegen

$$\begin{aligned} \mathbb{V}(F_n) &= \mathbb{E}(F_n^2) - (\mathbb{E}(F_n))^2 = \mathbb{E}((2k_n - n)^2) - (\mathbb{E}(2k_n - n))^2 \\ &= 4\mathbb{E}(k_n^2) - 4n\mathbb{E}(k_n) + n^2 - (4\mathbb{E}(k_n)^2 - 4n\mathbb{E}(k_n) + n^2) = 4\mathbb{V}(k_n) \end{aligned}$$

mit vier multiplizieren.

Die so genannte *Streuung*, die Wurzel aus der Varianz, von F_n ist damit $2\sqrt{np_0q_0}$. Sie ist ein Maß für den Betrag der Abweichung vom erwarteten Gewinn. Da die Streuung wie \sqrt{n} mit der Zahl der Spiele wächst, die Spieler aber n Euros eingesetzt haben, ist die Streuung im Verhältnis zum Gesamteinsatz von der Ordnung $\frac{1}{\sqrt{n}}$, also klein.

2.2 Korollar (Schwaches Gesetz der Großen Zahlen) Für alle $\varepsilon > 0$ gilt:

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \mathbb{P}_n \left(\left\{ \omega \in \Omega \mid \left| \frac{k_n(\omega)}{n} - p_0 \right| > \varepsilon \right\} \right) = 0.$$

Bew: Nach (2.3), (2.4) und der Chebychev-Ungleichung ist

$$\begin{aligned} \mathbb{P}_n \left(\left\{ \omega \in \Omega \mid \left| \frac{k_n(\omega)}{n} - p_0 \right| > \varepsilon \right\} \right) &= \mathbb{P}_n (\{ \omega \in \Omega \mid |k_n(\omega) - np_0| > n\varepsilon \}) \\ &= \mathbb{P}_n (\{ \omega \in \Omega \mid |k_n(\omega) - \mathbb{E}(k_n)| > n\varepsilon \}) \leq \frac{\mathbb{V}(k_n)}{(n\varepsilon)^2} = \frac{p_0 q_0}{n\varepsilon^2}, \end{aligned}$$

was für $n \rightarrow \infty$ gegen Null konvergiert. □

• Wie groß ist nun die Wahrscheinlichkeit dafür, dass Katharina L -mal gewinnt? Dieses Ereignis ist

$$E_L := \{ \omega \in \Omega \mid k_n(\omega) = L \};$$

bei allen $\omega \in E_L$ gewinnt Katharina also L -mal. Die Kardinalität von E_L ist

$$|E_L| = \binom{n}{L} = \frac{n!}{(n-L)!L!},$$

denn das ist die Zahl von Möglichkeiten, L Elemente aus einer n -elementigen Menge auszuwählen. Da die Wahrscheinlichkeit aller $\omega \in E_L$ gleich $p(\omega) = p_0^L q_0^{n-L}$ ist, ist $\mathbb{P}_n(E_L)$, die Wahrscheinlichkeit für das Ereignis E_L gegeben durch

$$\mathbb{P}_n(E_L) \equiv \sum_{\omega \in E_L} p(\omega) = \binom{n}{L} p_0^L \cdot q_0^{n-L} \quad (L = 0, \dots, n). \quad (2.5)$$

Im Sprachgebrauch der Wahrscheinlichkeitstheorie heißt die Verteilung $L \mapsto \mathbb{P}_n(E_L)$ *Binomial-* (oder *Bernoulli-*) *Verteilung* $B(n, p_0)$.

Offensichtlich gilt $E_L = F_n^{-1}(2L - n)$ mit F_n aus (2.2), E_L ist also gleichbedeutend mit dem Ereignis "Katharina gewinnt $2L - n$ Euros."

Rechnen wir die Wahrscheinlichkeiten für $n = 10$ Spiele und $p_0 = \frac{1}{2}$ aus:

x	± 10	± 8	± 6	± 4	± 2	0
$2^{10} \cdot \mathbb{P}_{10}(F_{10}^{-1}(x))$	1	10	45	120	210	252
$2^{10} \cdot 2 \cdot g_{0,10}(x)$	1.7	10.5	42.7	116.1	211.5	258.4

Bis auf die Ausnahmewerte $x = \pm 10$ stimmt diese Verteilung mit einer Genauigkeit von 5% mit den verdoppelten Werten der Gaußschen Glockenkurve

$$g_{\bar{x}, \sigma^2}(x) := \frac{\exp(-\frac{1}{2}(x - \bar{x})^2 / \sigma^2)}{\sqrt{2\pi\sigma^2}} \quad (x \in \mathbb{R}) \quad (2.6)$$

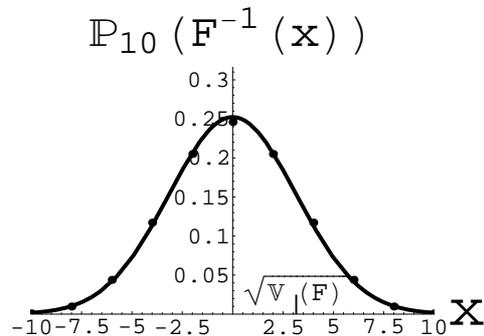


Abbildung 2.1: Gewinnverteilung bei $n = 10$ Münzwürfen, $p_0 = \frac{1}{2}$.

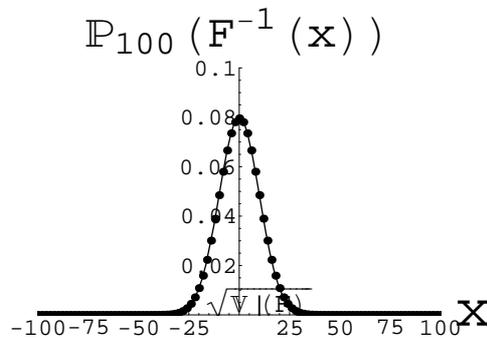


Abbildung 2.2: Gewinnverteilung bei $n = 100$ Münzwürfen, $p_0 = \frac{1}{2}$.

für Mittelwert $\bar{x} := \mathbb{E}(F_n) = n(p_0 - q_0) = 0$ und Varianz $\sigma^2 := \mathbb{V}(F_n) = 4np_0q_0 = n$, überein, siehe Abb. 2.1. Wir sehen hier den Zentralen Grenzwertsatz am Wirken, wobei $n = 10$ noch keine sehr große Zahl ist.

Während der Zentrale Grenzwertsatz uns Informationen über die wahrscheinlichsten Ereignisse E_L liefert, werden in der sog. "Theorie großer Abweichungen" Aussagen auch über die Wahrscheinlichkeit solcher E_L erzielt, für die L weit vom Erwartungswert \bar{x} entfernt ist:

2.3 Satz *Es sei $p_0 \in (0, 1)$, $q_0 := 1 - p_0$, $\bar{x} := \mathbb{E}(k_n) = np_0$ und $\sigma := \sqrt{\mathbb{V}(k_n)} = \sqrt{np_0q_0}$. Dann gilt:*

1. Zentraler Grenzwertsatz

Für $A > 0$ und alle $L \in \{0, \dots, n\}$ mit $|L - \bar{x}| < A\sigma$ gilt

$$\mathbb{P}_n(E_L) \sim g_{\bar{x}, \sigma^2}(L) \quad (n \rightarrow \infty)$$

im Sinne gleichmäßiger Konvergenz, d.h.

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \sup_{L: |L - \bar{x}| < A\sigma} \left| \frac{\mathbb{P}_n(E_L)}{g_{\bar{x}, \sigma^2}(L)} - 1 \right| = 0.$$

2. Große Abweichungen:

Es sei die **Ratenfunktion** $I : \mathbb{R} \rightarrow [0, \infty]$ (siehe Abb. 2.3) durch

$$I(x) := \begin{cases} x \ln\left(\frac{x}{p_0}\right) + (1-x) \ln\left(\frac{1-x}{q_0}\right) & , x \in [0, 1] \\ \infty & , x \notin [0, 1] \end{cases} \quad (2.7)$$

definiert². Dann gilt für alle Intervalle $(p^-, p^+) \subseteq \mathbb{R}$:

$$\lim_{n \rightarrow \infty} -\frac{1}{n} \ln \left(\sum_{L \in (np^-, np^+)} \mathbb{P}_n(E_L) \right) = \inf_{x \in (p^-, p^+)} I(x). \quad (2.8)$$

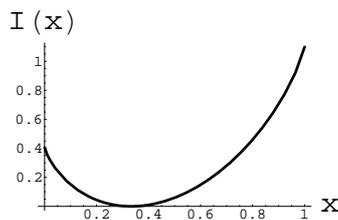


Abbildung 2.3: Die Ratenfunktion I der Bernoulliverteilung für $p_0 = 1/3$

Bew.:

- Tatsächlich ist I nicht negativ, denn wegen $I'(x) = \ln\left(\frac{x}{p_0}\right) - \ln\left(\frac{1-x}{q_0}\right)$ ist

$$I(p_0) = I'(p_0) = 0, \quad (2.9)$$

und $I|_{[0,1]}$ ist wegen $I''(x) = \frac{1}{x} + \frac{1}{1-x} > 0$ strikt konvex.

- Für $L \in (\varepsilon n, (1 - \varepsilon)n)$ können wir auf alle Faktoren des Binomialkoeffizienten $\binom{n}{L} = \frac{n!}{L!(n-L)!}$ die asymptotische *Sterlingsche Formel*

$$k! \sim \sqrt{2\pi k} \left(\frac{k}{e}\right)^k$$

²Wir setzen $\ln(0) := \lim_{x \searrow 0} \ln(x) = -\infty$ und $0 \ln(0) := \lim_{x \searrow 0} x \ln(x) = 0$.

anwenden und erhalten damit

$$\begin{aligned}\mathbb{P}_n(E_L) &= \binom{n}{L} p_0^L q_0^{n-L} \sim \sqrt{\frac{n}{2\pi L(n-L)}} \left(\frac{L}{np_0}\right)^{-L} \left(\frac{n-L}{nq_0}\right)^{L-n} \\ &= \sqrt{\frac{n}{2\pi L(n-L)}} \exp\left(-nI\left(\frac{L}{n}\right)\right) \quad (2.10)\end{aligned}$$

- Gilt nun, wie in der Voraussetzung des Zentralen Grenzwertsatzes gefordert, zusätzlich $\left|\frac{L}{n} - p_0\right| < \frac{A'}{\sqrt{n}}$ (mit $A' = \sqrt{p_0 q_0} A$), dann ist die Wurzel in (2.10) asymptotisch zu $(2\pi\sigma^2)^{-1/2}$, ergibt also den Nenner von (2.6). Gemäß (2.9) ergibt eine Taylorentwicklung

$$I(p_0 + \delta) = \frac{1}{2} \frac{\delta^2}{p_0 q_0} + \mathcal{O}(\delta^3).$$

Wir setzen diese in (2.10) ein und erhalten für $\delta := L/n - p_0$ die Aussage des Zentralen Grenzwertsatzes:

$$\begin{aligned}\mathbb{P}_n(E_L) &\sim \frac{\exp\left(-\frac{n\left(\frac{L}{n} - p_0\right)^2}{2p_0 q_0} + \mathcal{O}(n^{-1/2})\right)}{\sqrt{2\pi\sigma^2}} \\ &\sim \frac{\exp\left(-\frac{1}{2} \frac{(L - \bar{x})^2}{\sigma^2}\right)}{\sqrt{2\pi\sigma^2}} = g_{\bar{x}, \sigma^2}(L)\end{aligned}$$

- Falls im Satz über die großen Abweichungen die Intervalle (p^-, p^+) und $[0, 1]$ nicht überlappen, sind beide Seiten von (2.8) gleich ∞ .
- Ist dagegen $p_0 \in (p^-, p^+)$, dann ist die rechte Seite von (2.8) gleich 0, während sich für die linke Seite von (2.8) unter Verwendung von (2.10)

$$1 \geq \sum_{L \in (np^-, np^+)} \mathbb{P}_n(E_L) \geq \mathbb{P}_n(E_{\lfloor np_0 \rfloor}) \geq \frac{c}{\sqrt{n}}$$

ergibt. Damit ist auch die linke Seite von (2.8) gleich Null.

- Im verbleibenden Fall $(p^-, p^+) \cap [0, 1] \neq \emptyset$, aber $p_0 \notin (p^-, p^+)$ können wir ohne Beschränkung der Allgemeinheit (o.B.d.A.) $p^+ < p_0$ annehmen. Dann ist für die konvexe Funktion I wegen (2.9) die rechte Seite von (2.8) gleich

$$\inf_{x \in (p^-, p^+)} I(x) = I(p^+). \quad (2.11)$$

Da andererseits für $L \in (np^-, np^+)$ die Wahrscheinlichkeiten $L \mapsto \mathbb{P}_n(E_L)$ monoton anwachsen, gilt die asymptotische Ungleichung

$$\begin{aligned} -\frac{1}{n} \ln \left(\sum_{L \in (np^-, np^+)} \mathbb{P}_n(E_L) \right) &\geq -\frac{1}{n} \ln(n\mathbb{P}_n(E_{\lfloor np^+ \rfloor})) \\ &\sim -\frac{1}{n} \ln(\mathbb{P}_n(E_{\lfloor np^+ \rfloor})) \sim I\left(\frac{\lfloor np^+ \rfloor}{n}\right) \sim I(p^+) \end{aligned}$$

und wegen $\sum_L \mathbb{P}_n(E_L) \geq \mathbb{P}_n(E_{\lfloor np^+ \rfloor})$ die umgekehrte asymptotische Ungleichung, so dass

$$-\frac{1}{n} \ln \left(\sum_{L \in (np^-, np^+)} \mathbb{P}_n(E_L) \right) \sim I(p^+).$$

Daraus und aus (2.11) folgt auch in diesem Fall die Formel (2.8). \square

Es gibt zwei Gründe, weshalb dieses Beispiel so ausführlich diskutiert wurde. Zum einen soll es Grundkonzepte der Wahrscheinlichkeitstheorie illustrieren. Zum anderen werden wir sehen, dass wir die Ergebnisse der Rechnungen auch im Kontext der Statistischen Mechanik interpretieren können.

Zunächst die formalen Grundbegriffe der Wahrscheinlichkeitstheorie:

2.4 Definition • Ein **diskreter Wahrscheinlichkeitsraum** (Ω, p) besteht aus einer (nicht leeren) endlichen oder abzählbar unendlichen Menge Ω , deren Elemente **Elementarereignisse** heißen, und einer Abbildung

$$p : \Omega \rightarrow [0, 1] \quad \text{mit} \quad \sum_{\omega \in \Omega} p(\omega) = 1.$$

- $p(\omega)$ heißt **Wahrscheinlichkeit** von ω .
- Die Teilmengen $E \subseteq \Omega$ heißen **Ereignisse**,

$$\mathbb{P}(E) := \sum_{\omega \in E} p(\omega)$$

ihre **Wahrscheinlichkeit**, und $\mathbb{P} : 2^\Omega \rightarrow [0, 1]$ **Wahrscheinlichkeitsmaß**.

2.5 Definition Sei (Ω, p) ein (diskreter) Wahrscheinlichkeitsraum.

- Dann heißt eine Abbildung $F : \Omega \rightarrow \mathbb{R}$ **Zufallsvariable** oder **Zufallsgröße**.
- Konvergiert die Summe $\sum_{\omega \in \Omega} |F(\omega)|p(\omega)$, so heißt

$$\langle F \rangle := \mathbb{E}(F) := \sum_{\omega \in \Omega} F(\omega)p(\omega)$$

Erwartungswert von F .

- Konvergiert auch $\sum_{\omega \in \Omega} (F(\omega))^2 p(\omega)$, dann heißt

$$\mathbb{V}(F) := \mathbb{E}((F - \mathbb{E}(F))^2) = \mathbb{E}(F^2) - (\mathbb{E}(F))^2$$

Varianz von F .

Das Herausziehen einer Summe aus dem Erwartungswert ist allgemein möglich, da dieser ein lineares Funktional auf dem \mathbb{R} -Vektorraum $L^1(\Omega, \mathbb{P})$ der Zufallsgrößen ist.

2.6 Definition Die Ereignisse $E_1, \dots, E_n \subseteq \Omega$ heißen **unabhängig**, wenn für jede Teilmenge $I \subseteq \{1, \dots, n\}$ von Indices

$$\mathbb{P}\left(\bigcap_{i \in I} E_i\right) = \prod_{i \in I} \mathbb{P}(E_i)$$

gilt. Die Zufallsvariablen $F_1, \dots, F_n : \Omega \rightarrow \mathbb{R}$ heißen **unabhängig**, wenn für alle $a_1, \dots, a_n \in \mathbb{R}$ die Ereignisse $F_1^{-1}(a_1), \dots, F_n^{-1}(a_n)$ unabhängig sind.

2.7 Beispiel In unserem Beispiel waren die Funktionen $f_1, \dots, f_n : \Omega \rightarrow \{\pm 1\}$ unabhängig.

f_i und $F_n = \sum_{i=1}^n f_i$ sind sicher nicht unabhängig (außer wenn $p_0 = 1$ oder $p_0 = 0$ ist), denn der Gesamtgewinn hängt davon ab, ob beim i -ten Wurf gewonnen oder verloren wurde.

2.8 Bemerkungen 1. Der auf de Moivre und Laplace zurückgehende Zentrale Grenzwertsatz 2.3.1 für die Bernoulliverteilung lässt sich sehr weit auf Summen unabhängiger identisch verteilter Zufallsvariablen verallgemeinern. Er gilt sogar für schwach korrelierte Zufallsvariable wie die Spins eines wechselwirkenden klassischen Spinsystems bei hohen Temperaturen. Bei starken Korrelationen, wie sie bei niedrigen Temperaturen vorkommen, braucht aber kein Zentraler Grenzwertsatz zu gelten.

2. Grob gesagt liefert uns die Theorie großer Abweichungen für die Bernoulliverteilung die Formel

$$\mathbb{P}_n(E_L) \approx e^{-nI(L/n)}.$$

In physikalischer Terminologie ist damit $nI(L/n)$ ungefähr gleich der sog. Boltzmann-Entropie $\ln \mathbb{P}_n(E_L)$ des Ereignisses E_L .

3. Betrachtet man in Analogie zur Formel (2.8) für die großen Abweichungen der Bernoulliverteilung

$$\lim_{n \rightarrow \infty} -\frac{1}{n} \ln \left(\int_{np^-}^{np^+} g_{\bar{x}, \sigma^2}(L) dL \right) = \inf_{x \in (p^-, p^+)} I_G(x)$$

(mit $\bar{x} = np_0$ und $\sigma = \sqrt{np_0q_0}$), dann gilt dies wegen

$$\int_{np^-}^{np^+} g_{\bar{x}, \sigma^2}(L) dL = \sqrt{\frac{n}{2\pi p_0q_0}} \int_{p^-}^{p^+} \exp\left(-\frac{n}{2} \frac{(x - p_0)^2}{p_0q_0}\right) dx$$

für

$$I_G(x) := \frac{1}{2} \frac{(x - p_0)^2}{p_0q_0},$$

also die quadratische Taylorapproximation von I bei der Minimalstelle p_0 . Dass die Funktion I der Bernoulliverteilung von der Funktion I_G der sog. Normalverteilung abweicht, zeigt, dass die Theorie großer Abweichungen Aussagen liefert, die entscheidend vom untersuchten Modell abhängen.

Allgemein heißt die Funktion I *Cramér-Transformierte* oder auch *Ratenfunktion*, und sie läßt sich aus der Wahrscheinlichkeitsverteilung der zu addierenden unabhängigen Zufallsgrößen berechnen, siehe z.B. BAUER [Ba], §12.

2.2 Gibbsmaß endlicher Spinsysteme

In der Statistischen Mechanik (Thermodynamik) nennt man die Elementarereignisse des dort verwendeten Wahrscheinlichkeitsraums (abgekürzt W -Raums) auch *Konfigurationen*. Beispielsweise könnte der Grundraum der Phasenraum $\Omega := \mathbb{R}_p^{3n} \times \mathbb{R}_q^{3n}$ der Impulse p und Orte q von n Gasatomen sein. Eine Konfiguration $\omega \in \Omega$ ist dann durch Angabe der Orte und Impulse aller Gasatome fixiert. In der Statistischen Mechanik besitzt jede Konfiguration ω eine gewisse Energie $H(\omega)$, wir haben also eine Abbildung $H : \Omega \rightarrow \mathbb{R}$.

Mithilfe dieser Energiefunktion können wir für eine inverse Temperatur $\beta = 1/T$ das so genannte Gibbsmaß auf Ω einführen.

2.9 Definition Sei $H : \Omega \rightarrow \mathbb{R}$ und Ω eine endliche Menge von Konfigurationen. Dann heißt für eine inverse Temperatur $\beta \geq 0$ das Wahrscheinlichkeitsmaß mit Einzelwahrscheinlichkeiten

$$p_\beta : \Omega \rightarrow [0, 1] \quad , \quad p_\beta(\omega) := \frac{e^{-\beta H(\omega)}}{Z(\beta)}$$

mit **Zustandssumme**

$$Z(\beta) := \sum_{\omega \in \Omega} e^{-\beta H(\omega)}$$

Gibbsmaß für die inverse Temperatur β .

2.10 Beispiel Sei $\Omega := E^n = \underbrace{E \times \dots \times E}_{n\text{-mal}}$, wobei $E := \{\text{oben}, \text{unten}\}$ die

Menge der Einstellmöglichkeiten eines einzelnen so genannten *klassischen Spins* bezeichnet. $\omega = (\omega_1, \dots, \omega_n) \in \Omega$ ist dann eine Konfiguration von n Spins. Sei

$$s_i(\omega) := \begin{cases} 1 & , \omega_i = \text{oben} \\ -1 & , \omega_i = \text{unten} \end{cases}$$

und für $h \in \mathbb{R}$

$$H : \Omega \rightarrow \mathbb{R} \quad , \quad H := -h \sum_{i=1}^n s_i.$$

Dann ist für die inverse Temperatur $\beta \in \mathbb{R}$ das Gibbsmaß p_β durch

$$p_\beta(\omega) = p_0^{k_n(\omega)} q_0^{n-k_n(\omega)} \quad (\omega \in \Omega)$$

gegeben, wobei

$$k_n : \Omega \rightarrow \mathbb{N}_0 \quad , \quad k_n(\omega) = |\{i \in \{1, \dots, n\} \mid \omega_i = \text{oben}\}|,$$

$$p_0 := \frac{e^{\beta h}}{e^{\beta h} + e^{-\beta h}} \quad \text{und} \quad q_0 := \frac{e^{-\beta h}}{e^{\beta h} + e^{-\beta h}} = 1 - p_0$$

ist. Wir interpretieren h als die Stärke eines äußeren magnetischen Feldes, in dessen Richtung sich die Spins auszurichten trachten.

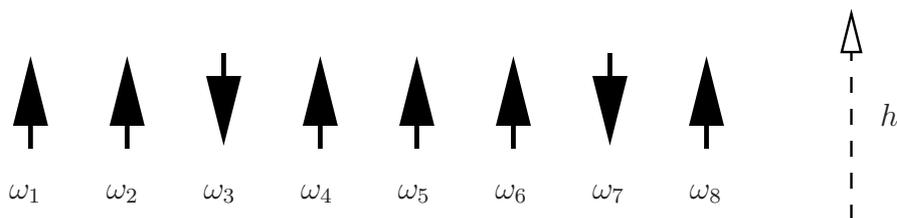


Abbildung 2.4: Spinkette im äußeren Magnetfeld

Da die Spins selbst als kleine Elementarmagnete wirken, liegt es nahe, die *mittlere Magnetisierung* $M_n : \Omega \rightarrow [-1, 1]$ durch $M_n := \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n s_i$ zu definieren.

Analog zum obigen Beispiel können wir den Erwartungswert $\langle M_n \rangle \equiv \mathbb{E}(M_n) = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \mathbb{E}(s_i)$ der Magnetisierung bezüglich p_β berechnen. Es ist damit

$$\langle M_n \rangle = p_0 - q_0 = \tanh(\beta h)$$

unabhängig von der Zahl n der Spins, denn diese wechselwirken ja auch nicht miteinander.

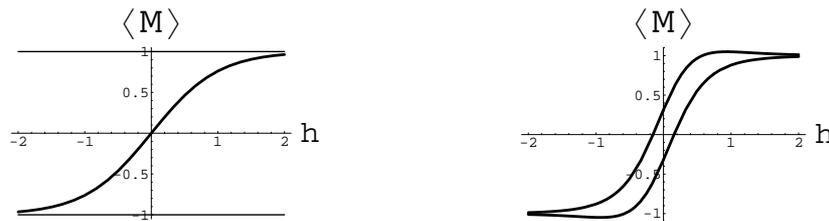


Abbildung 2.5: Links: Erwartungswert $\langle M_n \rangle$ der Magnetisierung als Funktion des äußeren Magnetfeldes h (bei inverser Temperatur $\beta = 1$).

Rechts: Intervall der Breite $2\sqrt{\mathbb{V}(M_n)}$ um $\langle M_n \rangle$, für $n = 10$ Teilchen

Wir sehen in Abb. 2.5, dass es uns nur bei tiefen Temperaturen bzw. starken Magnetfeldern einigermaßen gelingt, alle Elementarmagnete in gleicher Weise auszurichten.

Wie groß ist die Varianz $\mathbb{V}(M_n)$ der mittleren Magnetisierung? Analog zum obigen Beispiel ergibt sich:

$$\mathbb{V}(M_n) = \frac{4}{n} p_0 q_0 = \frac{1}{n \cosh^2(\beta h)}.$$

Die Streuung $\sqrt{\mathbb{V}(M)}$ von M_n ist also von der Größenordnung $\frac{1}{\sqrt{n}}$ und damit klein für viele Spins. Für 10^{24} Spins wäre die Streuung kleiner als 10^{-12} und damit unmessbar klein. Wieder war das Gesetz der großen Zahlen am Werk.

Wären nun die einzelnen Spins oder Atome eines Festkörpers tatsächlich *unabhängig* voneinander in dem Sinn, dass ihre Ausrichtungen s_i (etc.) unabhängige Zufallsgrößen wären, so wäre die Statistische Mechanik ein einfaches, wenn auch etwas langweiliges Geschäft.

In Wirklichkeit *wechselwirken* die Spins (oder Atome ...) miteinander, und die Wechselwirkung ist besonders stark, wenn die Atome räumlich nahe beieinander liegen. Die zu betrachtenden Energiefunktionen H werden dann komplizierter und die s_i werden nicht mehr unabhängig sein. Zwar können wir für *hohe Temperaturen* erwarten, dass die Ausrichtungen unabhängiger voneinander werden (für Temperatur $T = \infty$ ist $p_0(\omega) \equiv \frac{1}{|\Omega|}$).

Für *tiefe Temperaturen* aber braucht, wie wir sehen werden, bei wechselwirkenden Spins gar kein zentraler Grenzwertsatz für die mittlere Magnetisierung M_n zu gelten und die Varianz $\mathbb{V}(M_n)$ im thermodynamischen Limes nicht mehr gegen Null zu gehen.

Im thermodynamischen Limes werden stattdessen zwei Phasen mit *verschiedenen* Magnetisierungen existieren. In jeder dieser Phasen allerdings wird die mittlere Magnetisierung wieder eine streuungsfreie Größe sein.

2.3 Allgemeine Wahrscheinlichkeitstheorie

Die im letzten Kapitel betrachteten Spinsysteme hatten den technischen Vorteil, dass jedes Teilchen (klassischer Spin) zwei Einstellmöglichkeiten hatte, sodass der Raum Ω der Konfigurationen von n Spins eine endliche Menge war. Wir kamen daher mit dem Begriff des diskreten Wahrscheinlichkeitsraums aus.

Zwar werden wir auch im Folgenden schwerpunktmäßig Spinsysteme untersuchen, da diese technisch einfacher zu behandeln sind als allgemeine Systeme der klassischen Statistischen Mechanik. Trotzdem möchte ich die mathematischen Voraussetzungen für die Behandlung des allgemeinen Falls schaffen.

Außerdem werden wir im thermodynamischen Limes für Spinsysteme überabzählbar viele Konfigurationen betrachten.

2.11 Beispiel Nehmen wir beispielsweise n ungekoppelte, eindimensionale harmonische Oszillatoren gleicher Frequenz ω .

Der Phasenraum Ω hat also die Gestalt $\Omega = E^n$ mit $E := \mathbb{R}_p \times \mathbb{R}_q$. Wir können damit auch $\Omega = \mathbb{R}_p^n \times \mathbb{R}_q^n$ schreiben. Die Energiefunktion $H : \Omega \rightarrow \mathbb{R}$ ist durch

$$H(p_1, \dots, p_n, q_1, \dots, q_n) := \sum_{i=1}^n \frac{\omega}{2} (p_i^2 + q_i^2)$$

gegeben.

Wie können wir nun auf Ω in Verallgemeinerung des letzten Kapitels ein Gibbsmaß für Temperatur $T > 0$ einführen? Würde jede Konfiguration $(p, q) \in \Omega$ das Maß $\frac{1}{Z} e^{-H(p,q)/T}$ bekommen, so müsste $Z = \sum_{(p,q) \in \Omega} e^{-H(p,q)/T}$ sein, damit das Maß ein Wahrscheinlichkeitsmaß würde. Das ist offensichtlich Unfug, denn da Ω überabzählbar viele Punkte enthält, wäre Z formal gleich unendlich. Es ist auch zu erwarten, dass jede einzelne Konfiguration $(p, q) \in \Omega$ bezüglich eines sinnvoll definierten Gibbsmaßes Wahrscheinlichkeit Null besitzt. Es ist also sinnlos zu versuchen, Wahrscheinlichkeiten $\mathbb{P}(A)$ von Ereignissen $A \subseteq \Omega$ (etwa: $A := \{\text{der Impuls des dritten Teilchens ist positiv}\}$) durch Summierung $\mathbb{P}(A) = \sum_{\omega \in A} p(\omega)$ zu definieren.

Stattdessen ist die folgende Definition sinnvoll:

$$\mathbb{P}_\beta(A) := \frac{\int_A e^{-\beta H(p,q)} dp dq}{Z(\beta)}$$

mit 'Zustandssumme'

$$\begin{aligned} Z(\beta) &:= \int_{\Omega} e^{-\beta H(p,q)} dp dq & (2.12) \\ &= \int_{\Omega} \exp\left(-\frac{\beta\omega}{2} \sum_{i=1}^n (p_i^2 + q_i^2)\right) dp dq \\ &= \left[\int_{\mathbb{R}_p \times \mathbb{R}_q} \exp\left(-\frac{\beta\omega}{2} (p^2 + q^2)\right) dp dq \right]^n & r = \sqrt{p^2 + q^2} \\ &= \left[2\pi \int_0^\infty \exp\left(-\frac{\beta\omega}{2} r^2\right) r dr \right]^n = \left(\frac{2\pi}{\beta\omega}\right)^n = \left(\frac{2\pi T}{\omega}\right)^n. \end{aligned}$$

Ist andererseits $T = 0$, so liegt es nahe, als Gibbsmaß die Delta-Distribution δ_0 auf Ω zu betrachten, d. h. anzunehmen, dass alle Impulse und Orte der n Oszillatoren gleich Null sind.

Folgende allgemeine Definition eines Wahrscheinlichkeitsraumes hat sich als sinnvoll herausgestellt:

2.12 Definition Sei Ω eine Menge.

- Eine nichtleere Familie \mathcal{F} von Teilmengen von Ω heißt **Algebra**, wenn mit $A, B \in \mathcal{F}$ auch $A^c := \Omega \setminus A$, $A \cap B$ und $A \cup B \in \mathcal{F}$ sind.
- \mathcal{F} heißt σ -**Algebra**, wenn zusätzlich gilt:

$$(A_n \in \mathcal{F} \quad \forall n \in \mathbb{N}) \quad \implies \quad \bigcup_{n=1}^{\infty} A_n \in \mathcal{F}.$$

2.13 Beispiel Das Mengensystem \mathcal{F} bezüglich $\Omega := \mathbb{R}^n$, das durch Komplettbildung, Schnitt und abzählbare Vereinigung aus der Familie offener Teilmengen von \mathbb{R}^n entsteht, ist eine σ -Algebra und heißt σ -Algebra \mathcal{B} der *Borelmengen*. Insbesondere sind auch alle abgeschlossenen Mengen Borelmengen.

2.14 Definition • Eine Abbildung $\mathbb{P} : \mathcal{F} \rightarrow [0, 1]$ einer σ -Algebra \mathcal{F} auf Ω heißt **Wahrscheinlichkeitsmaß**, wenn

1. $\mathbb{P}(\emptyset) = 0$ und $\mathbb{P}(\Omega) = 1$

2. mit $A_n \in \mathcal{F}$, $n \in \mathbb{N}$, A_n paarweise disjunkt ($A_i \cap A_n = \emptyset$ für $i \neq n$) gilt

$$\mathbb{P}\left(\bigcup_{n=1}^{\infty} A_n\right) = \sum_{n=1}^{\infty} \mathbb{P}(A_n).$$

- Die Elemente $A \in \mathcal{F}$ heißen **Ereignisse**, $\mathbb{P}(A)$ ihre **Wahrscheinlichkeit**.
- $(\Omega, \mathcal{F}, \mathbb{P})$ heißt **Wahrscheinlichkeitsraum**.
- Die Elemente $\omega \in \Omega$ heißen **Elementarereignisse**.

2.15 Bemerkungen 1. Betrachten wir beispielsweise $\Omega := \mathbb{R}^n$, so ist die Familie $\mathcal{P}(\Omega) \equiv 2^\Omega$ aller Teilmengen sicher eine σ -Algebra. Sie ist aber für übliche maß- und wahrscheinlichkeitstheoretische Zwecke zu groß. Ein Versuch, alle Mengen zu messen, führt zu Paradoxien (z. B. Banach-Tarski). Wir werden uns damit begnügen "nur" Borelmengen im \mathbb{R}^n zu messen, d. h. in unserem Fall, ihnen Wahrscheinlichkeiten zuzuordnen.

2. Ist aber Ω eine *abzählbare* Menge wie in Kapitel 2, so können wir gestrost $\mathcal{F} := 2^\Omega$ setzen. Es stellt sich nämlich heraus, dass die Definition eines Wahrscheinlichkeitsraumes eine Verallgemeinerung der Definition eines diskreten Wahrscheinlichkeitsraumes ist. Wir hatten ja in Kapitel 2 die Existenz einer Funktion $p : \Omega \rightarrow [0, 1]$ mit $\sum_{\omega \in \Omega} p(\omega) = 1$ vorausgesetzt. Setzt man für $A \subseteq \Omega$ nun $\mathbb{P}(A) := \sum_{\omega \in A} p(\omega)$, so gelten offensichtlich die Bedingungen 1. $\mathbb{P}(\emptyset) = 0$, $\mathbb{P}(\Omega) = 1$ und 2. der Definition 5.8.

3. In der Statistischen Mechanik werden die Elementarereignisse *Konfigurationen*, das Wahrscheinlichkeitsmaß \mathbb{P} *Zustand* genannt.

Wir müssen noch die Zufallsvariablen eines Wahrscheinlichkeitsraumes definieren.

2.16 Definition • Eine Funktion $F : \Omega \rightarrow \mathbb{R}$ eines Wahrscheinlichkeitsraumes (Ω, \mathcal{F}, P) heißt **Zufallsgröße** oder **-variable**, wenn für alle Borelmengen $B \in \mathcal{B}$ von \mathbb{R} gilt:

$$F^{-1}(B) := \{\omega \in \Omega \mid F(\omega) \in B\} \in \mathcal{F}.$$

- Falls das Integral $\int_{\Omega} |F| dP < \infty$ ist, heißt

$$\langle F \rangle := \mathbb{E}(F) := \int_{\Omega} F dP$$

Erwartungswert der Zufallsvariable F .

- Die **Varianz** der Zufallsvariable F ist gegeben durch

$$\mathbb{V}(F) := \mathbb{E}((F - \mathbb{E}(F))^2) = \mathbb{E}(F^2) - (\mathbb{E}(F))^2 \in [0, \infty]. \quad (2.13)$$

2.17 Bemerkungen 1. Das Integral wird folgendermaßen eingeführt:

Zunächst setzt man für Funktionen F der Form $F = \mathbb{1}_A$ mit der charakteristischen Funktion $\mathbb{1}_A(\omega) := \begin{cases} 1 & \omega \in A \\ 0 & \omega \notin A \end{cases}$ $\mathbb{E}(F) := P(A)$. Dann setzt man linear fort auf Funktionen F der Gestalt $F = \sum_{i=1}^n a_i \mathbb{1}_{A_i}$ $a_i \in \mathbb{R}$, d. h. $\mathbb{E}(F) := \sum_{i=1}^n a_i P(A_i)$. Dann approximiert man (zunächst positive) messbare Funktionen F durch solche stückweise konstanten Funktionen F_n und überzeugt sich, dass $\mathbb{E}(F) := \lim_{n \rightarrow \infty} \mathbb{E}(F_n)$ nicht von der Wahl der Approximation abhängt.

2. Ist $\Omega = \mathbb{R}^n$ oder eine Mannigfaltigkeit, so sind insbesondere alle stetigen Funktionen $F : \Omega \rightarrow \mathbb{R}$ Zufallsgrößen.

Nach diesen allgemeinen Fragen kehren wir wieder zu den Gibbsmaßen zurück. Offensichtlich haben wir im Fall der harmonischen Oszillatoren ein Wahrscheinlichkeitsmaß auf Ω konstruiert, das wir als Gibbsmaß zur Energiefunktion H und Temperatur T ansprechen wollen. Wir sind dabei vom Lebesguemaß $dp dq$ auf dem $2n$ -dimensionalen Phasenraum Ω ausgegangen und haben dieses Maß mit der Dichte $e^{-\beta H(p,q)}$ multipliziert.

Bezüglich des so definierten Maßes hatte der Phasenraum das endliche Volumen $Z_n(\beta)$. Wir teilen das Maß $e^{-\beta H(p,q)} dp dq$ durch $Z_n(\beta)$ und erhalten so ein Wahrscheinlichkeitsmaß auf Ω .

Die Energiefunktion H ist eine stetige, also insbesondere lokal integrierbare Funktion. Das Gibbsmaß

$$d\mu_\beta := \frac{\exp(-\beta H(p, q))}{Z_n(\beta)} dp dq$$

ist daher bezüglich des Lebesguemaßes stetig. D.h. gilt für ein Ereignis $E \subseteq \Omega$ $\int_E dp dq = 0$, so gilt auch $\int_E d\mu_\beta = 0$ (Spezialfall des Satzes von Radon-Nikodym. Die Funktion $\frac{e^{-\beta H}}{Z(\beta)}$ auf dem Phasenraum ist damit die *Radon-Nikodym-Dichte* von $d\mu_\beta$ bezüglich $dp dq$).

Warum aber sind wir bei der Definition des Gibbsmaßes $d\mu_\beta$ von dem Lebesguemaß auf dem Phasenraum ausgegangen? Zum einen zeichnet sich dieses natürlich dadurch aus, dass es *translationsinvariant* ist, d. h. dass für alle Zufallsgrößen $F : \Omega \rightarrow \mathbb{R}$ und alle Translationen um $(p, q) \in \Omega$ gilt, dass

$$\int_{\Omega} F \circ T_{p,q} dp dq = \int_{\Omega} F dp dq$$

mit

$$T_{p,q} : \Omega \rightarrow \Omega \quad , \quad (p_0, q_0) \mapsto (p_0 + p, q_0 + q)$$

(soweit die Integrale existieren).

Zum anderen sollten wir nicht vergessen, dass die klassische Mechanik Grenztheorie zur Quantenmechanik ist. In der Quantenmechanik benötigt jeder Zustand ein Volumen h^n im n -dimensionalen Phasenraum Ω , sodass sich in einem Phasenraumgebiet $E \subseteq \Omega$ mit $\int_E dp dq < \infty$ nur etwa $\int_E \frac{dp dq}{h^n}$ Zustände befinden können. h bezeichnet hier das Plancksche Wirkungsquantum. Das Phasenraumvolumen eines (kohärenten) Zustandes ist unabhängig von seinem Orts- und Impulserwartungswert, sodass wir auch in der klassischen Mechanik von einem translationsinvarianten Maß im Phasenraum ausgehen sollten

Alle diese Maße aber sind Vielfache des Lebesguemaßes. Welches Vielfache ($\neq 0$) man wählt, ist für die Definition des *Wahrscheinlichkeitsmaßes* $d\mu_\beta$ unwesentlich.

Natürlich appelliert diese Motivation an die physikalische Intuition und ist in diesem Sinn unmathematisch. Mit der Theorie der so genannten kohärenten Zustände und der Pseudodifferentialoperatoren lässt sich aber auch eine mathematische Rechtfertigung geben ³.

2.4 Das Curie–Weiss–Modell

Wir erinnern uns an den in Kapitel 2.2. besprochenen Fall von n Spins im äußeren Magnetfeld für $h = 0$. Auf dem Konfigurationsraum $\Omega_n = E^n$ ($E = \{-1, 1\}$) ergab sich dann die Gleichverteilung als Wahrscheinlichkeitsmaß, und die mittlere Magnetisierung

$$M_n : \Omega_n \rightarrow [-1, 1] \quad , \quad M_n(\sigma) = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \sigma_i$$

besaß damit die Verteilung (Wahrscheinlichkeitsmaß auf \mathbb{R})

$$\mu_0 := \sum_{L=0}^n 2^{-n} \binom{n}{L} \delta_{(\frac{2L}{n}-1)},$$

also eine verschobene Binomialverteilung. Entsprechend dem Zentralen Grenzwertsatz (Satz 2.3.1) nähert sich für $n \rightarrow \infty$ diese Verteilung der Normalverteilung $g_{\bar{x}, \sigma^2}$ mit Erwartungswert $\bar{x} = 0$ und Streuung $\sigma = 1/\sqrt{n}$ an. Die dem Satz 2.3.2 analoge Aussage

$$\lim_{n \rightarrow \infty} -\frac{1}{n} \ln(\mu_0((m^-, m^+))) = \inf_{m \in (m^-, m^+)} I_0(m) \quad (2.14)$$

³Siehe z. B. Kapitel 4 von A. Knauf, Ya. Sinai: Classical Nonintegrability, Quantum Chaos. DMV–Seminar Band 27. Basel: Birkhäuser 1997

über große Abweichungen der Magnetisierung gilt für die Cramér-Transformierte (Ratenfunktion)

$$I_0(m) := \begin{cases} \frac{1+m}{2} \ln(1+m) + \frac{1-m}{2} \ln(1-m) & , |m| \leq 1 \\ \infty & , |m| > 1 \end{cases} .$$

Diese kann aus der Cramér-Transformierten (2.7) der Bernoulliverteilung durch die Transformation $I_0(m) = I\left(\frac{m+1}{2}\right)$ gewonnen werden, denn $\sigma \mapsto \frac{\sigma+1}{2}$ bildet den Spinwert -1 auf 0 , den Spinwert 1 auf 1 ab.

Vom Standpunkt der Statistischen Mechanik war dieses nicht wechselwirkende Spinsystem nicht übermäßig interessant. Wir betrachten nun aber die Energiefunktion

$$H_{h,n} : \Omega_n \rightarrow \mathbb{R} \quad , \quad H_{h,n}(\sigma) := -\frac{1}{2n} \sum_{k,l=1}^n \sigma_k \sigma_l - h \sum_{k=1}^n \sigma_k$$

des *Curie–Weiss–Modells*. In diesem wechselwirken alle n Spins gleichermaßen mit allen, und mit dem äußeren Magnetfeld der Stärke $h \in \mathbb{R}$. Der Vorfaktor $\frac{1}{2n}$ ist so gewählt, dass die Wechselwirkungsenergie jedes einzelnen Spins höchstens den Betrag $1/2$ besitzt, unabhängig von der Zahl n der Spins.

Mithilfe der mittleren Magnetisierung M_n können wir die Energiefunktion in der Form

$$H_{h,n} = -n\left(\frac{1}{2}M_n^2 + hM_n\right)$$

schreiben. Damit ergibt sich als Wahrscheinlichkeitsverteilung der Magnetisierung für das Gibbsmaß von $H_{h,n}$ bei inverser Temperatur β :

$$\mu_{\beta,h} = d_{\beta,h} \mu_0$$

mit Dichtefunktion

$$d_{\beta,h}(m) := \frac{\exp\left(\beta n \left(\frac{m^2}{2} + hm\right)\right)}{Z_{\beta,h}} \quad (2.15)$$

und Zustandssumme

$$\begin{aligned} Z_{\beta,h} &= \int_{\mathbb{R}} \exp\left(\beta n \left(\frac{m^2}{2} + hm\right)\right) d\mu_0(m) \\ &= \sum_{L=0}^n \exp\left[\beta n \left(\frac{1}{2} \left(\frac{2L}{n} - 1\right)^2 + h \left(\frac{2L}{n} - 1\right)\right)\right] \binom{n}{L} 2^{-n}. \end{aligned}$$

2.18 Satz Es sei für inverse Temperatur $\beta \geq 0$, $h \in \mathbb{R}$ und $m \in \mathbb{R}$

$$I_{\beta,h}(m) := I_0(m) - \beta \left(\frac{m^2}{2} + hm \right) - C(\beta, h),$$

wobei $C(\beta, h) \in \mathbb{R}$ so gewählt ist, dass $\inf_m I_{\beta,h}(m) = 0$ gilt, siehe Abb. 2.6. Dann gilt für alle Intervalle $(m^-, m^+) \subseteq \mathbb{R}$:

$$\lim_{n \rightarrow \infty} -\frac{1}{n} \ln(\mu_{\beta,h}((m^-, m^+))) = \inf_{m \in (m^-, m^+)} I_{\beta,h}(m).$$

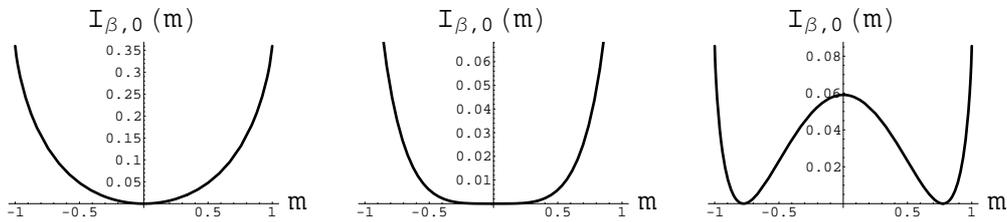


Abbildung 2.6: Cramér-Transformierte für das Curie-Weiss-Modell ($h = 0$). Links: $\beta = 2/3$, Mitte: $\beta = 1 = \beta_{\text{cr}}$, Rechts: $\beta = 4/3$

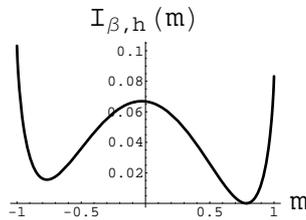


Abbildung 2.7: Cramér-Transformierte für das Curie-Weiss-Modell ($\beta = 4/3$, $h = 0.01$).

Bew.: Aus (2.14) folgert man

$$\lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \lim_{n \rightarrow \infty} -\frac{1}{n} \ln(\mu_0((m - \varepsilon, m + \varepsilon))) = I_0(m).$$

Daher ist mit (2.15)

$$\begin{aligned} & \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \lim_{n \rightarrow \infty} -\frac{1}{n} \ln(\mu_{\beta,h}((m - \varepsilon, m + \varepsilon))) \\ &= I_0(m) - \beta \left(\frac{m^2}{2} + hm \right) - \lim_{n \rightarrow \infty} \frac{1}{n} \ln(Z_{\beta,h}). \end{aligned}$$

Der Limes auf der rechten Seite existiert und ist gleich $C(\beta, h)$, denn es gilt ja die Normierung $\mu_{\beta, h}(\mathbb{R}) = 1$. \square

Betrachten wir nun die Minimalstellen m von $I_{\beta, h}$ in Abhängigkeit von inverser Temperatur β und äußerem Feld h . Nach Aussage des Satzes entsprechen ja die absoluten Minima von $I_{\beta, h}$ den am wahrscheinlichsten auftretenden Magnetisierungen. Es muss gelten $I'_{\beta, h}(m) = 0$ und $I''_{\beta, h}(m) \geq 0$, also

$$\frac{1}{2} \ln \left(\frac{1+m}{1-m} \right) = \beta(m+h) \quad \text{und} \quad m^2 \geq 1 - \frac{1}{\beta}.$$

Nach m umgeformt ergibt dies die Relation

$$\tanh(\beta(m+h)) = m \quad \text{und, für } \beta > 1 \quad |m| \geq \sqrt{1 - \frac{1}{\beta}}. \quad (2.16)$$

2.19 Satz Die absoluten Minima von $I_{\beta, h}$ liegen

1. für $h = 0$ und $\beta \leq \beta_{\text{cr}} := 1$ bei 0, für $\beta > \beta_{\text{cr}}$ bei $m^+(\beta)$ und $m^-(\beta)$, wobei $m^+ \in C^\infty((1, \infty))$ monoton wachsend ist mit $m^-(\beta) = -m^+(\beta)$,

$$\lim_{\beta \searrow \beta_{\text{cr}}} m^+(\beta) = 0 \quad \text{und} \quad \lim_{\beta \rightarrow \infty} m^+(\beta) = 1.$$

2. für $h > 0$ bei $m^+(\beta, h) > 0$, wobei diese glatte Funktion in beiden Argumenten monoton wächst.

Bew.: Kurvendiskussion unter Benutzung von Gleichung (2.16) (siehe auch den Anhang über die Mean-Field-Theorie). \square

Oberhalb der kritischen inversen Temperatur β_{cr} besitzt das Curie-Weiss-Modell damit im thermodynamischen Limes $n \rightarrow \infty$ also einen Phasenübergang.

Während aus Symmetriegründen für $h = 0$ und alle $\beta \geq 0$ der Erwartungswert $\mathbb{E}_{\beta, h}(M_n) = \int_{\mathbb{R}} m d\mu_{\beta, h}(m)$ der mittleren Magnetisierung gleich Null ist, gilt für $\beta > \beta_{\text{cr}}$ kein zentraler Grenzwertsatz mehr. In diesem Limes ist stattdessen die Magnetisierung mit Verschwinden der Wahrscheinlichkeit nahe bei Null. Dies folgt aus Satz 2.18 unter Verwendung von Satz 2.19.1. Stattdessen ist im Limes die Magnetisierung mit gleicher Wahrscheinlichkeit $1/2$ gleich $m^+(\beta)$ oder $m^-(\beta)$, denn für alle $\varepsilon > 0$ geht nach Satz 2.18 die Wahrscheinlichkeit des Auftretens eines von diesen Werten um mindestens ε verschiedenen Magnetisierung nach 0: Für

$$C_\varepsilon := \mathbb{R} \setminus ([m^+(\beta) - \varepsilon, m^+(\beta) + \varepsilon] \cup [m^-(\beta) - \varepsilon, m^-(\beta) + \varepsilon])$$

ist $\inf_{m \in C_\varepsilon} I_{\beta,0}(m) > 0$, also

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \mu_{\beta,0}(C_\varepsilon) = 0.$$

Dieses Phänomen ist wirklich subtil, denn während für divergierende Zahl n von Spins die Wechselwirkungsenergie zwischen jedem Paar von Spins wie $1/n$ gegen Null geht, tritt für Temperaturen kleiner 1 das kollektive Phänomen einer teilweisen Ordnung der Spinausrichtungen auf.

3 Quantenstatistik

3.1 Die Observablen-Algebra	28
3.2 Quantenmechanische Zustände	31
3.3 Der quantenmechanische harmonische Oszillator	33

Wir werden auch die Statistische Mechanik von Quantensystemen betrachten. Vorkenntnisse in der Quantenmechanik sind zwar nützlich, werden aber nicht vorausgesetzt. Um diese einzuführen, fassen wir zunächst zusammen, auf welchen Grundstrukturen die *klassische* (statistische) Mechanik basiert.

3.1 Die Observablen-Algebra

Da an dieser Stelle topologische Begriffe auftauchen, empfiehlt es sich, diese bei Bedarf in Anhang A nachzuschlagen.

1. Zunächst einmal der *Phasenraum* Ω der Konfigurationen $\omega \in \Omega$:
Wir nehmen an, dass auf Ω eine *Topologie* $\mathcal{O} \subseteq 2^\Omega$ gegeben ist, und dass der topologische Raum (Ω, \mathcal{O}) ein lokalkompakter Hausdorffraum ist.
 - Der Raum $\Omega = E^n$ mit $E := \{-1, 1\}$ (n "klassische Spins") mit der *diskreten* Topologie $\mathcal{O} = 2^\Omega$ ist kompakt.
 - Oft ist Ω eine Mannigfaltigkeit, z.B. $\Omega = (\mathbb{R}_p^3 \times \mathbb{R}_q^3)^n$ für die Impulse und Orte von n Teilchen im Raum. Dann ist Ω immerhin lokalkompakt.

Als σ -Algebra $\mathcal{F}(\Omega)$ auf dem Phasenraum (Ω, \mathcal{O}) wählen wir die σ -Algebra der Borelmengen⁴.

⁴**Satz** Es sei \mathcal{F} eine beliebige Familie von Teilmengen einer Menge Ω . Dann existiert eine eindeutige **kleinste** σ -Algebra $\sigma(\mathcal{F})$ von Ω mit $\mathcal{F} \subseteq \sigma(\mathcal{F})$, d.h., falls für eine σ -Algebra

2. Die *Observablen* sind stetige Funktionen $O : \Omega \rightarrow \mathbb{R}$. Die wichtigste Observable ist die Energiefunktion (Beispiel: $H(p, q) = \frac{1}{2} \sum_{k=1}^n (p_k^2 + q_k^2)$).

Die Observablen bilden unter punktweiser Addition und Multiplikation eine *Algebra*. Zum Vergleich mit der Quantenmechanik ist es nützlich, die Algebra $C(\Omega, \mathbb{C})$ der stetigen *komplexwertigen* Funktionen zu betrachten. Auf dieser lässt sich die *Adjungierte* von f durch $f^*(\omega) := \overline{f(\omega)}$ ($\omega \in \Omega$) definieren. Während stetige Funktionen auf nicht kompakten Räumen nicht beschränkt sein müssen, ist dies für die 'bei Unendlich verschwindenden' Funktionen aus

$$C_0(\Omega, \mathbb{C}) := \{f \in C(\Omega, \mathbb{C}) \mid \forall \varepsilon > 0 \exists \text{ Kompaktum } K_\varepsilon : |f|_{\Omega \setminus K_\varepsilon} < \varepsilon\}$$

der Fall. Mit der Supremumsnorm $\|f\| := \sup_{\omega \in \Omega} |f(\omega)|$ ist dann $C_0(\Omega, \mathbb{C})$ ein Banachraum.

3. Die *Zustände* der klassischen Statistischen Mechanik sind Wahrscheinlichkeitsmaße $\mathbb{P} : \mathcal{F}(\Omega) \rightarrow [0, 1]$. Mit ihrer Hilfe lässt sich für geeignete Observablen $O \in C(\Omega, \mathbb{C})$ deren *Erwartungswert* $\mathbb{E}(O) = \langle O \rangle = \int_{\Omega} O(\omega) d\mathbb{P}(\omega)$ definieren. Betrachten wir die Unteralgebra $\mathcal{A} := C_0(\Omega, \mathbb{C})$. Dann ist für jedes Borel-Wahrscheinlichkeitsmaß \mathbb{P} der Erwartungswert \mathbb{E} auf ganz \mathcal{A} definiert. Man kann daher auch einen Zustand als eine lineare Abbildung $O \mapsto \langle O \rangle$ von der Observablenalgebra \mathcal{A} in den Körper \mathbb{C} der komplexen Zahlen auffassen. Diese lineare Abbildung ist *positiv*, d. h.

$$\langle O \rangle \geq 0 \quad \text{falls} \quad O \text{ nichtnegativ, d. h. } \forall x \in \Omega : O(x) \geq 0$$

und *identitätserhaltend*, d.h. für die konstante Funktion⁵ $\mathbb{1}(x) \equiv 1$ ist

$$\langle \mathbb{1} \rangle = 1.$$

4. Erzeugt die Energiefunktion H einen (hamiltonschen) Fluss $\Phi_t : \Omega \rightarrow \Omega$, $t \in \mathbb{R}$ Zeitparameter, so wird damit auch die Menge der Observablen auf sich abgebildet: $O \mapsto O \circ \Phi_t$. Diese lineare Abbildung $\tilde{\Phi}_t : \mathcal{A} \rightarrow \mathcal{A}$ ist ein *Automorphismus* der Algebra \mathcal{A} . Es ist also insbesondere

$$\tilde{\Phi}_t(f + g) = \tilde{\Phi}_t(f) + \tilde{\Phi}_t(g) \quad \text{und} \quad \tilde{\Phi}_t(fg) = \tilde{\Phi}_t(f)\tilde{\Phi}_t(g).$$

Da die Hamiltonfunktion H flussinvariant ist ($H \circ \Phi_t = H$), ist auch der durch sie definierte Gibbszustand invariant, siehe Kapitel 14.

$\mathcal{M} \supset \mathcal{F}$ gilt, dass $\mathcal{M} \subseteq \sigma(\mathcal{F})$, dann ist $\mathcal{M} = \sigma(\mathcal{F})$. $\sigma(\mathcal{F})$ heißt die von \mathcal{F} erzeugte σ -Algebra.

Def.: Ist (Ω, \mathcal{O}) ein topologischer Raum, dann heißt die σ -Algebra $\mathcal{B} := \sigma(\mathcal{O})$ die σ -**Algebra der Borelmengen** $B \in \mathcal{B}$.

⁵Falls Ω kompakt ist, gilt $\mathbb{1} \in C_0(\Omega, \mathbb{C})$; sonst kann man $\mathcal{A} := C_0(\Omega, \mathbb{C}) \oplus \mathbb{C}\mathbb{1}$ benutzen.

Die in 2) definierte Observablen-Algebra ist sogar eine so genannte C^* -Algebra:

3.1 Definition Eine C^* -Algebra $\mathcal{A} = (\mathcal{A}, +, \cdot, *, \|\cdot\|)$ ist ein Banachraum $(\mathcal{A}, +, \|\cdot\|)$ über \mathbb{C} mit Multiplikation $\cdot : \mathcal{A} \times \mathcal{A} \rightarrow \mathcal{A}$ und Involution $*$: $\mathcal{A} \rightarrow \mathcal{A}$, sodass (mit $a, b, b_i \in \mathcal{A}$, $\alpha, \beta \in \mathbb{C}$):

- $a \cdot (b_1 + b_2) = a \cdot b_1 + a \cdot b_2$, $a \cdot (b \cdot c) = (a \cdot b) \cdot c$ und $(\alpha a) \cdot (\beta b) = \alpha \beta (a \cdot b)$.
- $a^{**} = a$, $(\alpha a)^* = \bar{\alpha} a^*$, $(a + b)^* = a^* + b^*$, $(a \cdot b)^* = b^* \cdot a^*$
- $\|a \cdot b\| \leq \|a\| \|b\|$, $\|a^* \cdot a\| = \|a\|^2$.

Umgekehrt ist jede abelsche C^* -Algebra isomorph zu einer C^* -Algebra der Form $C_0(\Omega, \mathbb{C})$ (Thm. I.3.1 aus DAVIDSON [Da]).

In der Quanten-(statistischen) Mechanik wird nun die abelsche C^* -Algebra \mathcal{A} durch eine nicht abelsche ersetzt.

1. Konkret wird anstelle des Phasenraumes ein Hilbertraum $(\mathcal{H}, \langle \cdot, \cdot \rangle)$ über den komplexen Zahlen \mathbb{C} zugrunde gelegt. $\mathcal{A} = B(\mathcal{H})$ ist dann eine C^* -Algebra.

- Im Fall von n quantenmechanischen Spins ist

$$\mathcal{H} = \bigotimes_{k=1}^n \mathbb{C}^2 = \underbrace{\mathbb{C}^2 \otimes \dots \otimes \mathbb{C}^2}_{n\text{-mal}}$$

wobei der 2-dimensionale Hilbertraum \mathbb{C}^2 einem einzelnen Spin zugeordnet ist und $\bigotimes_{k=1}^n \mathbb{C}^2$ das n -fache Tensorprodukt bezeichnet (dazu später).

- Für n quantenmechanische Teilchen im Raum hat der Hilbertraum die Form $\mathcal{H} = \bigotimes_{k=1}^n L^2(\mathbb{R}^3) \cong L^2(\mathbb{R}^{3n})$ (die quadratintegrierbaren Funktionen auf dem \mathbb{R}^{3n}).

2. Die *Observablen* sind selbstadjungierte Operatoren auf \mathcal{H} . Die wichtigste Observable ist der Hamiltonoperator (Bsp.: $H = \frac{1}{2} \sum_{k=1}^n \left(-\frac{\partial^2}{\partial q_k^2} + q_k^2 \right)$).

Im einfachsten Fall ist $O = O^* \in B(\mathcal{H})$, also ein beschränkter Operator auf \mathcal{H} . Wie das obige Beispiel des n -dimensionalen, quantenmechanischen harmonischen Oszillators zeigt, sind nicht alle interessierenden Observablen der Quantenmechanik beschränkt. Dies führt zu technischen Problemen, die wir aber weitgehend übergehen werden. Wir werden uns auch in der quantenstatistischen Mechanik hauptsächlich mit Spinsystemen beschäftigen, deren Hilbertraum endlich-dimensional ist, sodass die Operatoren durch Matrizen darstellbar sind.

3. Die *Zustände* der Quantenmechanik sind wieder positive, identitätserhaltende lineare Abbildungen $O \mapsto \langle O \rangle$ vom der Observablen-Algebra \mathcal{A} in den Körper \mathbb{C} .

3.2 Quantenmechanische Zustände

3.2 Definition Ein selbstadjungierter Operator $O \in B(\mathcal{H})$ heißt **positiv**, wenn für alle $v \in \mathcal{H}$ $\langle v, Ov \rangle \geq 0$.

Eine lineare Abbildung $\psi : B(\mathcal{H}) \rightarrow \mathbb{C}$ heißt **positiv**, wenn $\psi(O) \geq 0$ für alle positiven Operatoren $O \in B(\mathcal{H})$. Sie heißt **identitätserhaltend**, wenn $\psi(\mathbb{1}) = 1$.

Sie heißt **Zustand**, wenn sie positiv und identitätserhaltend ist.

3.3 Beispiel Sei $n = \dim(\mathcal{H}) < \infty$, wie das in den meisten unserer Beispiele auch sein wird. Dann ist $\dim(B(\mathcal{H})) = n^2$.

Die Spur (englisch: trace) eines Operators $O \in B(\mathcal{H})$ ist durch

$$\mathrm{tr}(O) := \sum_{i=1}^n \langle e_i, O e_i \rangle$$

gegeben, wobei (e_1, \dots, e_n) eine *ON*-Basis von \mathcal{H} ist. Damit ist die Spur ein lineares Funktional auf $B(\mathcal{H})$, das offensichtlich positiv ist. Wegen $\mathrm{tr}(\mathbb{1}) = n$ ist für $\rho := \frac{1}{n} \cdot \mathbb{1}$ die Abbildung $O \mapsto \mathrm{tr}(\rho O)$ ein Zustand. Es gilt $\mathrm{tr}(AB) = \sum_{i,k=1}^n A_{i,k} B_{k,i} = \mathrm{tr}(BA)$, woraus $\mathrm{tr}(UAU^{-1}) = \mathrm{tr}(A)$ für U unitär, also die Unabhängigkeit der Definition der Spur von der Wahl der *ON*-Basis folgt.

Sei jetzt $\rho \in B(\mathcal{H})$ allgemeiner ein positiver Operator mit $\mathrm{tr}(\rho) = 1$. Dann ist die Abbildung $\psi : B(\mathcal{H}) \rightarrow \mathbb{C}$, $O \mapsto \mathrm{tr}(\rho \cdot O)$ offensichtlich ein Zustand auf $B(\mathcal{H})$, denn $\psi(\mathbb{1}) = \mathrm{tr}(\rho) = 1$ und für O positiv und (e_1, \dots, e_n) Eigenbasis von O gilt

$$\begin{aligned} \mathrm{tr}(\rho O) &= \sum_{i=1}^n \langle e_i, \rho O e_i \rangle = \sum_{i=1}^n \left\langle e_i, \rho \left(\sum_{j=1}^n p_j \right) O e_i \right\rangle \\ &= \sum_{i=1}^n \langle e_i, \rho e_i \rangle \langle e_i, O e_i \rangle \geq 0 \end{aligned}$$

mit $p_j = p_j^* = p_j^2 = |e_j\rangle\langle e_j|$ (in Physikernotation) Orthogonalprojektor auf den von e_j aufgespannten eindimensionalen Unterraum von \mathcal{H} . ρ heißt dann Dichtematrix zum Zustand ψ .

Tatsächlich lässt sich im endlich-dimensionalen Fall jeder Zustand in der Form $O \mapsto \mathrm{tr}(\rho \cdot O)$ mit $\rho \geq 0$, $\mathrm{tr}\rho = 1$ schreiben, denn der Dualraum von $B(\mathcal{H})$ ist

in diesem Fall wieder $\cong B(\mathcal{H})$, sodass sich jedes lineare Funktional in der Form $O \mapsto \text{tr}(\sigma O)$, $\sigma \in B(\mathcal{H})$ geeignet, schreiben lässt. Dass dann die Bedingungen $\rho \geq 0$, $\text{tr}\rho = 1$ für einen Zustand notwendig sind, ist offensichtlich.

Wenn $\dim \mathcal{H} = \infty$ ist, ist $B(\mathcal{H})$ nicht mehr reflexiv, sodass es so genannte nicht normale Zustände gibt, die sich nicht in der Form $O \mapsto \text{tr}(\rho O)$, $\rho \geq 0$ Spurklasseoperator mit $\text{tr}\rho = 1$ schreiben lassen.

Zwar sind diese Zustände für die Statistische Mechanik von Bedeutung, wir brauchen uns aber zunächst nicht den Kopf um sie zu zerbrechen.

- Als letzten Punkt auf unserer Liste müssen wir noch überlegen, wie die quantenmechanische Zeitentwicklung aussieht. Wir nehmen an, dass wir einen selbstadjungierten Operator H auf dem Hilbertraum \mathcal{H} als Hamiltonoperator auserkoren haben. Wir setzen jetzt für den Zeitparameter

$$t \in \mathbb{R} \quad U(t) := \exp(-iHt),$$

wobei wir für $A \in B(\mathcal{H})$ den Ausdruck auf der rechten Seite durch $\exp(A) := \sum_{n=0}^{\infty} \frac{A^n}{n!}$, also die konvergente Potenzreihe der Exponentialfunktion angewandt auf den beschränkten Operator definieren. Im Fall unbeschränkter Operatoren H ist $U(t)$ mittels des so genannten Funktionalkalküls definiert.

Offensichtlich ist $U^*(t) = U^{-1}(t)$, also $U(t)$ unitär, und es gilt

$$U(0) = \mathbb{1} \quad , \quad U(t_1)U(t_2) = U(t_1 + t_2).$$

Die Zeitevolution einer Observablen O ist dann definiert durch

$$\mathbb{R} \rightarrow B(\mathcal{H}) \quad , \quad t \mapsto O_t := U(-t)OU(t).$$

Zumindest für einen endlich-dimensionalen Hilbertraum können wir mit Hilfe des Hamiltonoperators H einen Temperaturzustand definieren, ähnlich wie im klassischen Fall.

3.4 Definition *Der Temperatur- oder Gibbszustand eines selbstadjungierten Operators H für die inverse Temperatur $\beta \geq 0$ ist durch die Dichtematrix*

$$\rho_\beta := \frac{\exp(-\beta H)}{\text{tr}(\exp(-\beta H))}$$

gegeben, falls die **Zustandssumme** $Z(\beta) := \text{tr}(\exp(-\beta H)) < \infty$.

Es muß also $\exp(-\beta H)$ ein Spurklasseoperator sein. Da die Dichtematrix eine (operatorwertige) Funktion des Hamiltonoperators ist, gilt die folgende, manchmal als *Quantenmechanischer Satz von Liouville* bezeichnete Aussage:

3.5 Satz *Der Gibbszustand für $T > 0$ und Hamiltonoperator H ist zeitinvariant.*

Bew.: Sei $O \in B(\mathcal{H})$. Es gilt für alle Zeiten $t \in \mathbb{R}$

$$\text{tr}(\rho_\beta O_t) = \text{tr}(\rho_\beta U(-t)OU(t)) = \text{tr}(U(-t)\rho_\beta OU(t)) = \text{tr}(\rho_\beta O).$$

Denn die operatorwertigen Funktionen ρ_β und $U(-t) = \exp(iHt)$ des gleichen Operators H kommutieren: $[\rho_\beta, U(-t)] = 0$.

Außerdem dürfen Operatoren unter der Spur zyklisch permutiert werden. \square

Wichtig ist festzuhalten, dass die quantenstatistische Mechanik im Gegensatz zur klassischen Statistischen Mechanik *keine* wahrscheinlichkeitstheoretische Basis besitzt. Der technische Grund ist der, dass Zustände über nicht abelschen Algebren nicht als Wahrscheinlichkeitsmaße interpretiert werden können. Die physikalische Interpretation ist folgende: Eine Messung des quantenmechanischen Systems verändert im Allgemeinen dessen Zustand. Werden zwei nicht vertauschende Observable gemessen, so hängt das Ergebnis von der Reihenfolge der beiden Messungen ab.

3.3 Der quantenmechanische harmonische Oszillator

Wir betrachten den eindimensionalen *quantenmechanischen harmonischen Oszillator* mit dem unbeschränkten Hamiltonoperator

$$H := \frac{\omega}{2} \left(-\frac{d^2}{dq^2} + q^2 \right) \quad \text{auf dem Hilbertraum } \mathcal{H} := L^2(\mathbb{R}).$$

$$\text{Sei } A := \frac{1}{\sqrt{2}} \left(q + \frac{d}{dq} \right) \quad \text{und} \quad A^* := \frac{1}{\sqrt{2}} \left(q - \frac{d}{dq} \right)$$

(A^* , der zu A adjungierte Operator, heißt in der Physik "Erzeuger" und A "Vernichter").

Dann gilt $H = \omega \left(A^*A + \frac{1}{2} \right)$ und $[A, A^*] = 1$.

Ist $\Omega_0 \in L^2(\mathbb{R})$ und $A\Omega_0 = 0$, so ist Ω_0 Eigenvektor von H mit Eigenwert $\frac{\omega}{2}$: $H\Omega_0 = \frac{\omega}{2}\Omega_0$.

$A\Omega_0 = 0$ bedeutet $\frac{d\Omega_0(q)}{dq} = -q \cdot \Omega_0(q)$, also zusammen mit der Normierungsbedingung $\|\Omega_0\|^2 \equiv \int_{\mathbb{R}} |\Omega_0(q)|^2 dq = 1 \implies \Omega_0(q) = \pi^{-1/4} e^{-q^2/2}$.

Mit Ω_0 ist auch $(A^*)^n \Omega_0$ Eigenvektor von H :

$$HA^{*n}\Omega_0 = A^{*n}H\Omega_0 + [H, A^{*n}]\Omega_0 = \omega \left(\frac{1}{2} + n \right) A^{*n}\Omega_0,$$

sodass das Spektrum von H zumindest die Punkte $\{\omega \left(\frac{1}{2} + n \right) \mid n = 0, 1, \dots\}$ umfasst. Wegen

$$\begin{aligned} \langle A^{*n}\Omega_0, A^{*n}\Omega_0 \rangle &= \langle \Omega_0, A^n A^{*n}\Omega_0 \rangle = \langle \Omega_0, A^{n-1} [A, A^{*n}]\Omega_0 \rangle \\ &= n \langle \Omega_0, A^{n-1} A^{*n-1}\Omega_0 \rangle = \dots = n! \langle \Omega_0, \Omega_0 \rangle = n! \end{aligned}$$

sind die Eigenvektoren $\Omega_n := \frac{1}{\sqrt{n!}} A^{*n} \Omega_0$ orthonormal (siehe Abb. 3.1).

Sie sind auch als Hermitefunktionen bekannt. Diese bilden eine Orthonormalbasis⁶ des $L^2(\mathbb{R})$. Also ist das Spektrum des Operator gleich

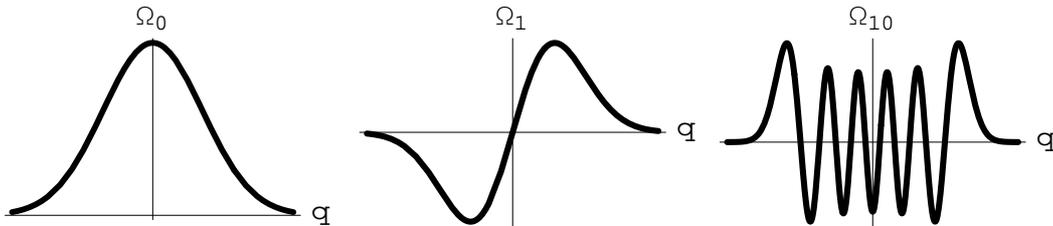


Abbildung 3.1: Eigenfunktionen $\Omega_n \in L^2(\mathbb{R})$ des harmonischen Oszillators

$$\text{spec}(H) = \left\{ \omega \left(\frac{1}{2} + n \right) \mid n \in \mathbb{N}_0 \right\}. \quad (3.1)$$

Damit können wir die Temperaturzustände von H bestimmen, denn für $\beta > 0$ ist

$$\exp(-\beta H) = \sum_{n=0}^{\infty} e^{-\beta \omega \left(n + \frac{1}{2} \right)} \cdot |\Omega_n\rangle \langle \Omega_n|$$

ein Spurklasseoperator. Die Zustandssumme $Z(\beta) := \text{tr}(\exp(-\beta H))$ ist

$$Z(\beta) = \sum_{n=0}^{\infty} e^{-\beta \omega \left(n + \frac{1}{2} \right)} = \frac{e^{-\beta \omega / 2}}{1 - e^{-\beta \omega}} = \frac{1}{e^{\beta \omega / 2} - e^{-\beta \omega / 2}} = (2 \sinh(\beta \omega / 2))^{-1}.$$

Also ist die Dichtematrix $\rho_\beta = \exp(-\beta H) / Z(\beta) = 2 \sinh(\beta \omega / 2) \cdot \exp(-\beta H)$.

Der Erwartungswert der Energie (siehe Abb. 3.2) ist damit

$$\begin{aligned} \langle H \rangle_{\text{qm}}(\beta) &= \text{tr}(\rho_\beta H) = 2 \sinh(\beta \omega / 2) \cdot \sum_{n=0}^{\infty} \omega \left(n + \frac{1}{2} \right) e^{-\beta \left(n + \frac{1}{2} \right) \omega} \\ &= \frac{\omega}{2} \coth(\beta \omega / 2), \end{aligned}$$

denn

$$\sum_{n=0}^{\infty} \omega \left(n + \frac{1}{2} \right) e^{-\beta \omega \left(n + \frac{1}{2} \right)} = -\frac{d}{d\beta} \sum_{n=0}^{\infty} e^{-\beta \omega \left(n + \frac{1}{2} \right)} = -\frac{d}{d\beta} \frac{1}{2 \sinh(\beta \omega / 2)}.$$

⁶**Bew.: 1)** Die durch $v \in \mathbb{R}$ parametrisierten Vektoren $q \mapsto \chi_v(q) := e^{ivq} \Omega_0(q)$ spannen den $L^2(\mathbb{R})$ auf. Denn sei $\psi \in L^2(\mathbb{R})$, und $(\chi_v, \psi) \equiv 0$. Dann ist die Fouriertransformierte der L^2 -Funktion $x \mapsto \tilde{\psi}(x) := \Omega_0(x) \psi(x)$, gleich 0, also auch $\tilde{\psi} = 0$ und damit $\psi = 0$.

2) Die χ_v liegen im Spann der Ω_n , siehe z.B. GLIMM und JAFFE [GJ], Prop. 1.5.7.

Natürlich kann der Energieerwartungswert nicht unter die Grundzustandsenergie $\frac{\omega}{2}$ fallen ($T = 0$). Andererseits gilt für $T \rightarrow \infty$: $\langle H \rangle (\frac{1}{T}) \sim T$.

Zum Vergleich berechnen wir den Energieerwartungswert für einen klassischen harmonischen Oszillator mit Hamiltonfunktion

$$H : \mathbb{R}_p \times \mathbb{R}_q \rightarrow \mathbb{R} \quad , \quad H(p, q) := \frac{\omega}{2}(p^2 + q^2).$$

Die Zustandssumme $Z(\beta) = \frac{2\pi}{\beta\omega}$ wurde schon in (2.12) berechnet. Andererseits ist $\int_{\Omega} H e^{-\beta H} dp dq = \frac{2\pi}{\beta^2\omega}$, sodass

$$\langle H \rangle_{\text{kl}}(\beta) = \frac{\int_{\Omega} H e^{-\beta H} dp dq}{Z(\beta)} = \frac{1}{\beta} = T$$

ist, unabhängig von $\omega > 0$. Offenbar folgt daraus für n harmonische Oszillatoren in d Dimensionen ein Energie-Erwartungswert ndT (sog. Dulong-Petitsche Regel).

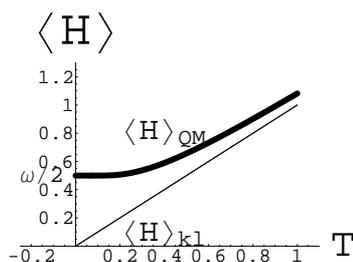


Abbildung 3.2: Energieerwartungswerte des klassischen bzw. quantenmechanischen harmonischen Oszillators für Temperatur T

Für hohe Temperaturen gleichen sich die Erwartungswerte an, ein typisches Phänomen.

Sowohl in der klassischen als auch in der Quantenmechanik ergibt sich im thermodynamischen Limes $n \rightarrow \infty$ wieder eine verschwindende Streuung der mittleren Energie von n ungekoppelten Oszillatoren.

4 Entropie

4.1 Geometrie der Zustände	36
4.2 Entropie eines Zustandes	37
4.3 Die statistischen Ensembles	40

4.1 Geometrie der Zustände

Wir haben gesehen, dass sowohl im klassischen wie auch im quantenmechanischen Fall Zustände positive, lineare, identitätserhaltende Funktionale auf dem Raum der Observablen waren. Offensichtlich bilden sie damit eine konvexe Menge:

Sind nämlich ρ_1 und ρ_2 Zustände, so ist für $0 \leq \lambda \leq 1$

$$\lambda\rho_1 + (1 - \lambda)\rho_2$$

linear, positiv und identitätserhaltend, also ebenfalls ein Zustand.

Wir kennen aus unserer endlich-dimensionalen Anschauung Beispiele für kompakte, konvexe Mengen, etwa Tetraeder oder Vollkugeln. In diesen Beispielen sind bestimmte Punkte, etwa die Ecken des Tetraeders (Simplex) oder die Oberfläche der Vollkugel dadurch ausgezeichnet, dass sie sich einerseits nicht als nicht triviale Konvexkombinationen anderer Punkte darstellen lassen, andererseits alle Punkte Konvexkombinationen der extremalen Punkte sind.

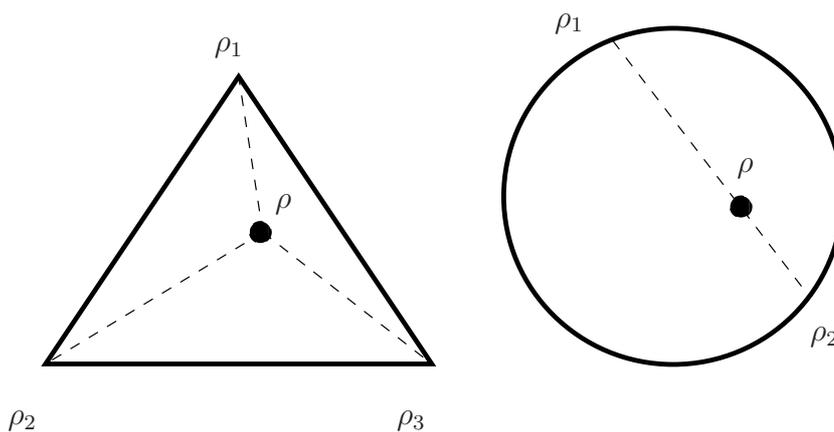


Abbildung 4.1: Darstellung eines Zustandes ρ als Konvexkombination extremaler Zustände ρ_i

4.1 Definition Ein Zustand ρ heißt **rein** oder **extremal**, wenn es keine Zustände $\rho_1 \neq \rho_2$ mit $\rho = \lambda\rho_1 + (1 - \lambda)\rho_2$ für $0 < \lambda < 1$ gibt.

4.2 Beispiel 1. Auf der Observablenalgebra der klassischen Mechanik, also der Menge $C(\Omega)$ der stetigen Funktionen über dem Phasenraum Ω , sind die reinen Zustände von der Form

$$\rho_x : C(\Omega) \rightarrow \mathbb{C} \quad , \quad f \mapsto f(x) \quad (x \in \Omega).$$

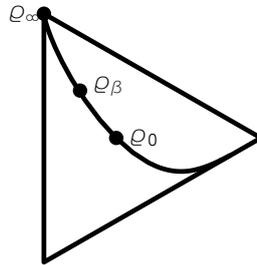


Abbildung 4.2: Familie der Gibbszustände einer Energiefunktion $H : \Omega \rightarrow \mathbb{R}$, mit $|\Omega| = 3$

2. Auf der Observablenalgebra der Quantenmechanik, also der Menge $B(\mathcal{H})$ der beschränkten Operatoren über dem Hilbertraum \mathcal{H} , sind die reinen Zustände von der Form

$$\rho_\psi : B(\mathcal{H}) \rightarrow \mathbb{C} \quad , \quad O \mapsto \langle \psi, O\psi \rangle \quad (\psi \in \mathcal{H} \text{ mit } \|\psi\| = 1).$$

Dabei gilt

$$\rho_{\lambda\psi} = \rho_\psi \quad \text{für} \quad \lambda \in \mathbb{C} \quad , \quad |\lambda| = 1.$$

Ähnlich wie in unserer endlich-dimensionalen Anschauung konvexer Mengen lassen sich auch in der klassischen und Quantenmechanik alle Zustände als (im Allgemeinen nun aber nicht mehr endliche) Linearkombination extremaler Zustände darstellen. Diese Darstellung ist in der klassischen Mechanik (im Wesentlichen) eindeutig, in der Quantenmechanik jedoch nicht:

4.3 Beispiel

1. $\Omega = \{1, \dots, n\}$, $\rho_i : C(\Omega) \rightarrow \mathbb{C}$, $f \mapsto f(i)$, $i \in \{1, \dots, n\}$.

Jeder Zustand ρ lässt sich hier eindeutig in der Form $\rho = \sum_{i=1}^n \lambda_i \rho_i$ schreiben mit $\lambda_i \geq 0$, $\sum_{i=1}^n \lambda_i = 1$.

Die Menge der Zustände bildet also ein Simplex mit n Ecken.

2. Der *Spurzustand* φ mit Dichtematrix $\frac{1}{n}\mathbb{1}$, $n := \dim \mathcal{H} < \infty$ lässt sich in der Form $\varphi(O) = \sum_{i=1}^n \frac{1}{n} \langle \psi_i, O\psi_i \rangle$, (ψ_1, \dots, ψ_n) ONB von \mathcal{H} , darstellen. Natürlich ist diese Basis – und damit die Zerlegung in extremale Zustände – nicht eindeutig.

4.2 Entropie eines Zustandes

Wir wollen nun die Entropie eines Zustandes einführen, eine Zahl, die als Maß für dessen Reinheit dient. Reine Zustände werden entsprechend dieser Definition Entropie Null besitzen; gemischte Entropie > 0 .

4.4 Definition Wir setzen $\eta : [0, \infty) \rightarrow \mathbb{R}$, $\eta(x) := -x \ln(x)$ für $x > 0$ und $\eta(0) := 0$.

1. Sei (Ω, p) ein diskreter Wahrscheinlichkeitsraum. Dann ist die **(Shannon)-Entropie** $S \equiv S(p)$ gegeben durch

$$S(p) := \sum_{\omega \in \Omega} \eta(p(\omega)).$$

2. Sei ρ eine Dichtematrix bezüglich der Observablenalgebra $B(\mathcal{H})$. Dann ist die **(v. Neumann)-Entropie** $S \equiv S(\rho)$ gegeben durch

$$S(\rho) := \text{tr}(\eta(\rho))$$

4.5 Bemerkungen 1. Da ρ positiv ist, gilt $\rho = \sum_i \lambda_i P_i$ mit zueinander orthogonalen Projektoren P_i vom Rang 1. Damit wird $\rho \ln \rho = \sum_i P_i \lambda_i \ln \lambda_i$ und $S = -\sum \lambda_i \ln \lambda_i$. Wir bemerken, daß die Entropie eines abgeschlossenen Systems zeitlich konstant ist, denn für die unitäre Zeitevolution $U(t)$ gilt $S(U(t)\rho U^*(t)) = S(\rho)$, siehe auch Anhang C.

2. Die Funktion η ist auf $[0, 1]$ nichtnegativ, auf $(0, 1)$ strikt positiv und außerdem konkav, denn ihre zweite Ableitung ist $-\frac{1}{x} < 0$ (siehe Abb. 4.3).

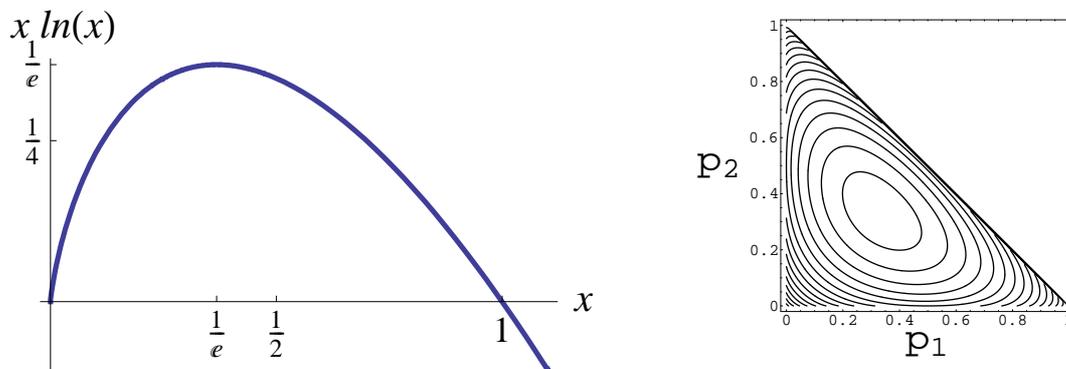


Abbildung 4.3: Links: Die Entropiefunktion η ; Rechts: Niveaulinien der Entropie für $|\Omega| = 3$

Ist daher $\sum_i -\lambda_i \ln \lambda_i = 0$ für $\lambda_i \geq 0$, $\sum_i \lambda_i = 1$, so dürfen die λ_i nur die Werte 0 oder 1 annehmen, was zur Folge hat, dass genau einer dieser Koeffizienten gleich 1 ist. Also haben genau die reinen Zustände Entropie Null.

3. Die Definition der Entropie scheint zunächst willkürlich, es gibt aber verschiedene Motivationen. Eine kommt aus der Informationstheorie. Wir interpretieren einen endlichen Wahrscheinlichkeitsraum (Ω, p) als Menge von Zeichen ω_i (oder Wörtern etc.) mit relativen Häufigkeiten p_i . Beispielsweise kann Ω aus dem Alphabet bestehen und $p(\omega_i)$ beschreibt die Häufigkeiten der einzelnen Buchstaben im Alphabet. Was ist der mittlere Informationsgehalt eines Zeichens, gemessen in Bits? Offensichtlich die Zahl der Bits, die im Mittel zu seiner Codierung nötig sind. Dabei sollte eine optimale Codierung verwendet werden.

4.6 Beispiel 1. $|\Omega| = 2^n$, $p(\omega_i) = 2^{-n}$. Alle Zeichen kommen also gleich häufig vor. Dann können wir jedes Zeichen mit n Bits codieren, der Informationsgehalt beträgt also (höchstens) n Bits.

$$S = - \sum_{i=1}^{2^n} p_i \log_2 p_i = n$$

2. $\Omega = \{\omega_1, \omega_2, \omega_3\}$ $p(\omega_1) = \frac{1}{2}$, $p(\omega_2) = p(\omega_3) = \frac{1}{4}$

Wir können natürlich jedes der Zeichen mit zwei Bits codieren, sodass der Informationsgehalt höchstens zwei Bits beträgt. Wir können aber auch nach der Tabelle

$$\begin{array}{ccc} \omega_1 & \omega_2 & \omega_3 \\ \hline 1 & 01 & 00 \end{array}$$

codieren. In der Hälfte der Fälle brauchen wir dann nur ein Bit, sodass der mittlere Informationsgehalt höchstens $3/2$ Bits beträgt. Wieder haben wir Übereinstimmung mit der Entropie:

$$S = -\frac{1}{2} \log_2 \frac{1}{2} - \frac{1}{4} \log_2 \frac{1}{4} - \frac{1}{4} \log_2 \frac{1}{4} = \frac{3}{2} \log_2 2 = \frac{3}{2}.$$

Es existiert ein allgemeines Codierungsverfahren, der so genannte Huffman-Code, das im Mittel x Bits zur Codierung benötigt, wobei

$$S(p) \leq x \leq S(p) + 1.$$

Es lässt sich einerseits beweisen, dass der Huffman-Code optimal ist, andererseits, dass bei iterierter Anwendung die mittlere Codierungslänge tatsächlich gegen $S(p)$ konvergiert. In diesem Sinn misst also die Entropie den mittleren Informationsgehalt. (Nebenbei: Die bei Verwendung des Huffman-Codes mögliche Kompression von Nachrichten wird in entsprechenden Computerprogrammen zur Verkleinerung des benötigten Speicherplatzes benutzt.)

Die Entropie ist also ein Maß für die Mischung eines Zustandes bzw. über unsere Unkenntnis darüber, in welchem der reinen Zustände als deren Konvexkombination der Zustand sich darstellen lässt, das System sich befindet. Die Entropie ist also insbesondere keine Observable (Messgröße).

3. Wir können zwar auch im Fall eines Phasenraumes $\Omega = \mathbb{R}_p^n \times \mathbb{R}_q^n$ dessen Wahrscheinlichkeitsmaß p durch eine Dichtefunktion $d : \Omega \rightarrow \mathbb{R}^+$ zu schreiben ist, eine Entropie $S = S(p)$ durch

$$S := \int_{\Omega} \eta(d(p, q)) dp dq$$

definieren. In diesem Fall ist aber S nicht mehr notwendig positiv. Die reinen Zustände haben sogar formal Entropie $-\infty$.

4. Dass in der physikalischen Definition der natürliche statt des dyadischen Logarithmus verwendet wird, ist eine (nützliche) Konvention. Sie führt zu einem Faktor $\ln 2 \approx 0.69$ in der Umrechnung.

4.3 Die statistischen Ensembles

Wir wollen nun den Gibbszustand durch die Entropie charakterisieren. Als technische Voraussetzung benötigen wir den Satz von Klein. Er wird uns noch an anderer Stelle begegnen.

4.7 Satz (Klein) *Es sei $f \in C^1(I, \mathbb{R})$ konvex auf dem Intervall $I \subseteq \mathbb{R}$, \mathcal{H} ein Hilbertraum mit $n := \dim(\mathcal{H}) < \infty$ und $A, B \in B(\mathcal{H})$ selbstadjungiert mit Spektren $\text{spec}(A), \text{spec}(B) \subseteq I$. Dann gilt*

$$\boxed{\text{tr}(f(B)) \geq \text{tr}(f(A) + (B - A)f'(A))}. \quad (4.1)$$

Ist f strikt konvex, so gilt Gleichheit nur für $A = B$.

Bew.: • Wir zeigen den Satz zunächst für $n = 1$. Dann sind A und B einfache Zahlen aus I und die Aussage besitzt eine einfache graphische Interpretation. Beliebige Tangenten an den Graphen einer konvexen Funktion liegen unterhalb des Graphen und haben, falls die Funktion strikt konvex ist, nur einen Berührungspunkt, siehe Abb. 4.4. Daraus ergibt sich die Aussage für $n = 1$.

- Wir führen den Fall $n > 1$ auf den Fall $n = 1$ zurück. Dazu benutzen wir die Spektraldarstellungen

$$A = \sum_{\lambda \in \text{spec}(A)} \lambda P_{\lambda} \quad , \quad B = \sum_{\mu \in \text{spec}(B)} \mu Q_{\mu}$$

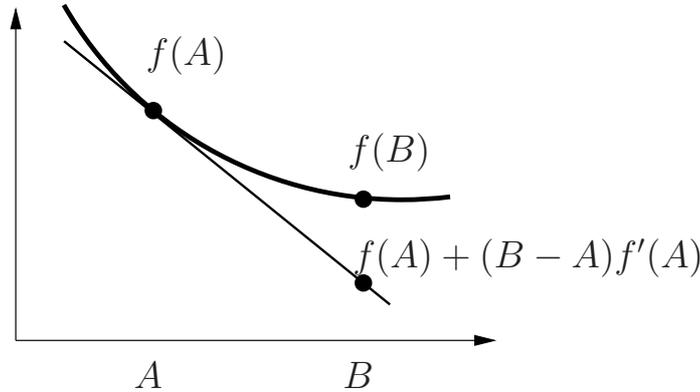


Abbildung 4.4: Kleinsche Ungleichung in Dimension $n = 1$

mit Projektionen P_λ, Q_μ .

Nach dem Funktionalkalkül ist damit $f(A) = \sum_{\lambda \in \text{spec}(A)} f(\lambda)P_\lambda$ und $f(B) = \sum_{\mu \in \text{spec}(B)} f(\mu)Q_\mu$. Mit $\sum_{\lambda \in \text{spec}(A)} P_\lambda = \sum_{\mu \in \text{spec}(B)} Q_\mu = \mathbb{1}$, folgt

$$\begin{aligned} \text{tr}[f(B) - f(A) - (B - A)f'(A)] &= & (4.2) \\ = \sum_{\lambda \in \text{spec}(A)} \sum_{\mu \in \text{spec}(B)} \underbrace{[f(\mu) - f(\lambda) - (\mu - \lambda)f'(\lambda)]}_{\geq 0} \cdot \text{tr}[Q_\mu P_\lambda]. \end{aligned}$$

Es gilt aber wegen $P_\lambda = P_\lambda P_\lambda = P_\lambda^*, Q_\mu = Q_\mu Q_\mu = Q_\mu^*$

$$\begin{aligned} \text{tr}[Q_\mu P_\lambda] &= \text{tr}[Q_\mu^* Q_\mu P_\lambda P_\lambda^*] = \text{tr}[P_\lambda^* Q_\mu^* Q_\mu P_\lambda] \\ &= \text{tr}[C^* C] \geq 0 \quad \text{mit } C := Q_\mu P_\lambda. \end{aligned} \quad (4.3)$$

Damit ist die schwache Ungleichung bewiesen.

- Es ist nach (4.3) $\text{tr}[Q_\mu P_\lambda] = 0$ genau dann, wenn $C^* C = 0$, also $C = 0$.

Wir nehmen (4.2) = 0 an und beweisen $A = B$ für strikt konvexes f .

— Zunächst folgt Gleichheit der Spektren von A und B . Gäbe es nämlich o.B.d.A. ein $\mu \in \text{spec}(B) \setminus \text{spec}(A)$, so würde die Summation über $\text{spec}(A)$ mindestens einen positiven Term liefern, da einerseits alle Faktoren $f(\mu) - f(\lambda) - (\mu - \lambda)f'(\lambda)$ in (4.2) größer Null sind, andererseits wegen

$$\sum_{\lambda \in \text{spec}(A)} \text{tr}(Q_\mu P_\lambda) = \text{tr}(Q_\mu) > 0$$

nicht alle Spuren gleich Null sind.

— Wir wollen nun zeigen, dass für $\lambda \in \text{spec}(A) = \text{spec}(B)$ auch $P_\lambda = Q_\lambda$ gilt. Sei im Gegenteil $P_\lambda \neq Q_\lambda$. Dann ist $\text{tr}(Q_\lambda P_\lambda) < \max(\text{tr}(Q_\lambda), \text{tr}(P_\lambda))$. Wir

nehmen o.B.d.A. an: $\text{tr}(Q_\lambda P_\lambda) < \text{tr}(Q_\lambda)$. Dann existiert wegen

$$0 < \text{tr}(Q_\lambda(\mathbb{1} - P_\lambda)) = \sum_{\mu \in \text{spec}(A) \setminus \{\lambda\}} \text{tr}(Q_\lambda P_\mu)$$

ein positiver Term in (4.2). Widerspruch! \square

Mithilfe des Satzes von Klein zeigen wir nun folgende Aussage.

4.8 Satz *Es sei $n := \dim(\mathcal{H}) < \infty$ und $A_1, \dots, A_v \in B(\mathcal{H})$ selbstadjungiert. Es seien $\mu_1, \dots, \mu_v \in \mathbb{R}$, die Dichtematrix $\rho_\mu \in B(\mathcal{H})$ gegeben durch*

$$\rho_\mu := \frac{\exp(-\sum_{i=1}^v \mu_i A_i)}{Z(\mu)} \quad \text{mit Zustandssumme } Z(\mu) := \text{tr} \left(\exp \left(-\sum_{i=1}^v \mu_i A_i \right) \right)$$

und $\rho \neq \rho_\mu$ eine Dichtematrix mit

$$\text{tr}(\rho A_i) = \text{tr}(\rho_\mu A_i) \quad (i = 1, \dots, v).$$

Dann gilt $S(\rho) < S(\rho_\mu)$.

Bew.: Mit η aus Def. 4.4 ist $S(\rho) = \text{tr}(\eta(\rho))$. η ist strikt konkav (da $\eta''(x) = -\frac{1}{x} < 0$ auf dem offenen Intervall $I := (0, \infty)$). Daher ist $-\eta$ strikt konvex. Außerdem ist $f := -\eta|_I$ glatt. Für $A := \rho_\mu$ und $B := \rho$ gilt $\text{spec}(A) \subseteq I$, $\text{spec}(B) \subseteq \bar{I} = [0, \infty)$.

Die Kleinsche Ungleichung (4.1) gilt in ihrer strikten Form zunächst nur, falls auch $\text{spec}(B) \subseteq I$. Der allgemeine Fall folgt aber aus der Stetigkeit von η . Es gilt also nach der Kleinschen Ungleichung

$$S(\rho) < S(\rho_\mu) - \text{tr}((\rho - \rho_\mu) \cdot \eta'(\rho_\mu)).$$

Wegen $\text{spec}(\rho_\mu) \subseteq I$ ist $\eta'(\rho_\mu)$ wohldefiniert. Wir sind fertig, wenn wir zeigen können, dass $\text{tr}((\rho - \rho_\mu) \cdot \eta'(\rho_\mu)) = 0$, d.h. dass die Richtungsableitung verschwindet. Es gilt

$$\eta'(x) = -1 - \ln(x) \quad \text{und} \quad -\ln(\rho_\mu) = \ln Z(\mu) + \sum_{i=1}^v \mu_i A_i,$$

sodass

$$\text{tr}((\rho - \rho_\mu)\eta'(\rho_\mu)) = (-1 + \ln Z(\mu)) \cdot \text{tr}(\rho - \rho_\mu) + \sum_{i=1}^v \mu_i \text{tr}((\rho - \rho_\mu)A_i) = 0,$$

denn $\text{tr}(\rho) = \text{tr}(\rho_\mu) = 1$ und $\text{tr}(\rho A_i) = \text{tr}(\rho_\mu A_i)$ nach Voraussetzung. \square

Die Aussage des Satzes ist, dass der verallgemeinerte Gibbszustand ρ_μ unter allen Zuständen ρ mit gleichen Erwartungswerten $\text{tr}(\rho A_i)$ der Observablen A_i die Entropie maximiert.

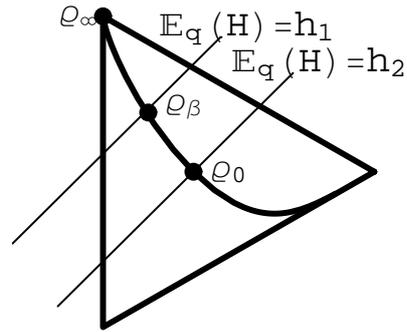
4.9 Beispiel 1. $v = 0$: Wir erhalten den Spurzustand auf $B(\mathcal{H})$, mit Dichtematrix $\rho_\mu = \frac{1}{n}\mathbb{1}$. Dieser realisiert das globale Entropiemaximum $S_{\max} = \ln(n)$.

2. $v = 1$. Hier wird für $\mu = \beta$ und $A = H$ (Hamiltonoperator) der kanonische Gibbszustand als derjenige entlarvt, der bei gegebenem Energieerwartungswert die Entropie maximiert, siehe nebenstehende Abbildung.

Durch diese Tatsache wird gerechtfertigt, dass wir, wenn wir keine zusätzliche Information über den Zustand besitzen, annehmen, dass sich das System im kanonischen Gibbszustand befindet. Denn jede andere Wahl würde eine größere Information, d.h. kleinere Entropie über den Zustand vortäuschen, als uns zur Verfügung steht.

Nicht gelöst wird allerdings die

(schwierige) Frage, ob ein Nichtgleichgewichtszustand sich mit der Zeit einem solchen Gibbszustand nähert.



Die Gibbsmaße ρ_β als Maximierer der Entropiefunktion unter der Nebenbedingung vorgegebenen Energieerwartungswertes

3. $v = 2$. Wählen wir $A_1 := H$ und $A_2 := N$ (Teilchenzahloperator), dann kommen wir zum großkanonischen Ensemble. In der Physik schreibt man dann üblicherweise $\mu_1 := \beta$ und $\mu_2 := \beta\mu$ und nennt μ das chemische Potential. Wir können damit statistische Systeme mit variabler Teilchenzahl beschreiben. Eine Anwendung findet sich in Kap. 15.

4.10 Bemerkungen 1. Wir haben zwar eine Aussage für quantenmechanische Systeme abgeleitet, aber der Satz führt auch zu einer analogen Aussage für *klassische* Spinsysteme. Betrachten wir nämlich für $\Omega := E^n$ mit $E := \{-1, 1\}$ den Hilbertraum $\mathcal{H}_n := \bigotimes_{i=1}^n \mathcal{H}$ mit $\mathcal{H} := \mathbb{C}^2$, so können wir die Abbildung

$$\varphi : E \rightarrow \mathcal{H} \quad , \quad \varphi(1) := \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \quad , \quad \varphi(-1) := \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$$

fortsetzen zu

$$\varphi_n : \Omega \rightarrow \mathcal{H}_n \quad , \quad \varphi_n((\omega_1, \dots, \omega_n)) := \bigotimes_{i=1}^n \varphi(\omega_i).$$

Wenn wir die Observablen $O : \Omega \rightarrow \mathbb{R}$ mittels $\psi_n : C(\Omega) \rightarrow B(\mathcal{H}_n)$ auf die Operatoren abbilden, die bezüglich der Basis $(\varphi_n(\omega), \omega \in \Omega)$ von \mathcal{H}_n diagonal sind und auf der Basis die klassischen Werte besitzen, d. h.

$$\psi_n(O) \cdot \varphi_n(\omega) = O(\omega)\varphi_n(\omega) \quad (\omega \in \Omega),$$

so haben wir die klassischen Spinsysteme als spezielle quantenmechanische Systeme uminterpretiert. Der klassische Ausdruck für die Entropie eines Wahrscheinlichkeitsmaßes geht dabei in den quantenmechanischen Ausdruck über. Insbesondere geht $S_i : \Omega \rightarrow \mathbb{R}$ $S_i(\omega) := \omega_i$ in $\sigma_i^3 := \psi_n(S_i)$

über. Es gilt $\sigma_i^3 = \overbrace{\mathbb{1} \otimes \dots \otimes \mathbb{1} \otimes \underbrace{\sigma^3}_{i\text{-te Stelle}} \otimes \dots \otimes \mathbb{1}}^{n \text{ Faktoren}}$ mit

$$\mathbb{1} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \in B(\mathcal{H}) \quad \text{und Pauli-Spin-Matrix} \quad \sigma^3 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \in B(\mathcal{H}).$$

2. Es ist naheliegend, dass sich die obige Aussage für endlich-dimensionale Hilberträume auf unendlich-dimensionale Räume verallgemeinern lässt. Dabei dürfen die A_i aber nicht mehr beliebige selbstadjungierte Operatoren sein, da sonst im Allgemeinen $Z(\mu) = \infty$ wird.
3. Man kann sogar unter Voraussetzung der Konvexität die Forderung der stetigen Differenzierbarkeit fallen lassen, wenn man die Aussage etwas umformuliert. Konvexe Funktionen sind immerhin stetig, an abzählbar vielen Stellen kann aber die (existierende) Linksableitung kleiner als die (ebenfalls existierende) Rechtsableitung sein, die Funktion also einen Knick besitzen. In der Aussage sind dann alle Geraden durch $f(A)$ zulässig, deren Steigung zwischen Links- und Rechtsableitung bei A liegt.

Eine solche Verallgemeinerung ist im Zusammenhang von Phasenübergängen interessant, denn dort besitzen thermodynamische Funktionen bzw. deren Ableitungen im Allgemeinen Knicke.

5 Klassische Spinsysteme

5.1 Klassische Spins	45
5.2 Endliche Spinsysteme	46
5.3 Der Konfigurationsraum eines unendlichen Spinsystems	49
5.4 Die Wechselwirkung eines unendlichen Spinsystems	52
5.5 Wahrscheinlichkeitsmaße für unendliche Spinsysteme	56

5.1 Klassische Spins

Im einleitenden Beispiel 2.10 haben wir angenommen, dass ein einzelner klassischer Spin in zwei Richtungen weisen kann. Wir haben daher als Raum seiner Konfigurationen $E := \{\text{oben}, \text{unten}\}$ gewählt. Natürlich können wir jede andere zweielementige Menge benutzen, z.B. $E := \{-1, 1\}$. Diese Wahl hat den Vorteil, die Notation zu vereinfachen.

Weiter haben wir in Beispiel 2.10 angenommen, dass für $\beta = 0$ (also für den Fall, dass das Gibbsmaß von der Wahl der Energiefunktion unabhängig ist), die beiden Elemente von E Wahrscheinlichkeit $1/2$ besitzen.

Es ist nun weder physikalisch noch mathematisch zwingend, sich auf den Fall zweiwertiger Spins einzuschränken. Sehr allgemein definieren wir daher:

5.1 Definition *Ein klassischer Spin ist ein Maßraum (E, \mathcal{E}, μ) . μ heißt a-priori-Maß.*

5.2 Beispiele 1. Der bis jetzt diskutierte Fall entspricht $E = \{-1, 1\}$, mit σ -Algebra $\mathcal{E} := 2^E$ und a-priori-Maß μ mit $\mu(-1) = \mu(1) = 1/2$.

2. In leichter Verallgemeinerung kann man annehmen, dass der Spin in $r \in \mathbb{N}$ verschiedene Richtungen zeigen kann, und setzt entsprechend den Spin als Restklassengruppe $E := \mathbb{Z}_r := \mathbb{Z}/r\mathbb{Z}$ mit $\mathcal{E} := 2^E$ an. Üblicherweise wird als a-priori-Maß das translationsinvariante Wahrscheinlichkeitsmaß mit $\mu(\sigma) = 1/r$ ($\sigma \in E$) gewählt (z.B. beim sog. Pottsmodell).

3. Beim so genannten *planaren* Spin ist der Raum der Einstellmöglichkeiten der Kreis: $E := S^1$. Bequem ist es, ihn als $S^1 = \{\sigma \in \mathbb{C} \mid |\sigma| = 1\}$ mit Borel- σ -Algebra \mathcal{E} und invariantem Wahrscheinlichkeitsmaß μ (d.h. $\mu(\{e^{i\theta} \mid 0 \leq \theta_1 < \theta < \theta_2 \leq 2\pi\}) = \frac{\theta_2 - \theta_1}{2\pi}$) einzuführen. Manchmal werden auch räumliche Spins, d.h. $E = S^2$ untersucht.

4. Es werden auch nicht kompakte topologische Räume wie \mathbb{Z} oder \mathbb{R} als Räume klassischer Spins untersucht, Letztere z.B. bei den so genannten Gaußschen Modellen. Aus Bequemlichkeit werden auch auf den Gruppen \mathbb{Z} und \mathbb{R} die translationsinvarianten Maße (zählendes bzw. Lebesguemaß) benutzt, obwohl diese keine Wahrscheinlichkeitsmaße sind. Allerdings wird dann die Energiefunktion $H : E \rightarrow \mathbb{R}$ dafür sorgen, dass für $\beta > 0$ das Maß $\int_E e^{-\beta H(\sigma)} d\mu(\sigma) < \infty$ ist. Beispielsweise ist für die Gaußschen Modelle $H(\sigma) = -\frac{1}{2}\sigma^2$.

5.2 Endliche Spinsysteme

Ein einzelner klassischer Spin kann in zwei Richtungen weisen. Wir haben daher den Raum seiner Konfigurationen als $E := \{\text{oben, unten}\}$ eingeführt. Natürlich können wir jede andere zwei-elementige Menge benutzen, z. B. $E := \{-1, 1\}$. Diese Wahl hat den Vorteil, die Notation zu vereinfachen. Ein System von k Spins ist nun durch Angabe einer Energiefunktion $H : \Omega \rightarrow \mathbb{R}$ auf dem Raum $\Omega := E^k$ ihrer Konfigurationen charakterisiert. Ein einfaches Beispiel ist das der Ising-Spinkette:

5.3 Beispiel (Ising-Spinkette) Es sei für Parameter $J, h \in \mathbb{R}$ und $\Omega := E^k$ die Energiefunktion

$$H_k(\sigma) := -J \sum_{i=1}^{k-1} \sigma_i \sigma_{i+1} - h \sum_{i=1}^k \sigma_i \quad (\sigma \equiv (\sigma_1, \dots, \sigma_k) \in \Omega).$$

Die Parameter J und h werden als Kopplung zwischen benachbarten Spins bzw. als äußeres Magnetfeld interpretiert.

Die obige Darstellung von H_k durch eine Summe von Produkten von Spinvariablen $\sigma_i \in E$ ist offensichtlich schon für ein festes $k \in \mathbb{N}$ kompakter als eine Wertetabelle von H_k .

Es stellt sich die Frage, ob wir beliebige Energiefunktionen $H : \Omega \rightarrow \mathbb{R}$ in ähnlicher Form darstellen können, d. h. für geeignete Konstanten $J(\Lambda) \in \mathbb{R}$ und mit den Abbildungen

$$E^k \rightarrow \{-1, 1\} \quad , \quad \sigma \mapsto \sigma_\Lambda := \prod_{i \in \Lambda} \sigma_i \quad (\Lambda \subseteq \{1, \dots, k\})$$

(also $\sigma_\emptyset = 1$) in der Form

$$H(\sigma) = - \sum_{\Lambda \subseteq \{1, \dots, k\}} J(\Lambda) \cdot \sigma_\Lambda \quad (\sigma \in \Omega).$$

Die zweite Frage ist, ob eine solche Darstellung, wenn sie existiert, auch eindeutig ist, d. h. ob die Koeffizienten $J(\Lambda)$ eindeutig durch H festgelegt sind.

Beides ist der Fall und wir werden eine Formel herleiten, die die Koeffizienten $J(\Lambda)$ als Funktionen von H darstellt.

Der Schlüssel zu dem obigen Problem liegt in der Tatsache, dass $E = \{-1, 1\}$ eine multiplikative Gruppe ist. Damit ist auch E^k als kartesisches Produkt multiplikativer Gruppen eine multiplikative Gruppe: Für $\sigma, \tau \in E^k$ ist das Produkt $\sigma\tau \in E^k$ durch

$$\sigma\tau := (\sigma_1\tau_1, \dots, \sigma_k\tau_k)$$

definiert. Das neutrale Element der Gruppe E^k hat damit die Form $\mathbb{1} = (1, \dots, 1)$, und jedes Element $\sigma \in E^k$ ist zu sich selbst invers: $\sigma\sigma = \mathbb{1}$.

Die additive Gruppe $\mathbb{Z}_2 = (\{0, 1\}, +)$ (Addition modulo 2) ist offensichtlich via

$$\varphi : \mathbb{Z}_2 \rightarrow E \quad , \quad n \mapsto (-1)^n$$

zu der multiplikativen Gruppe E isomorph. Also ist

$$\varphi_k : \mathbb{Z}_2^k \rightarrow E^k \quad , \quad (n_1, \dots, n_k) \mapsto (\varphi(n_1), \dots, \varphi(n_k))$$

ein Isomorphismus der Gruppen \mathbb{Z}_2^k und E^k .

Dieser Zusammenhang ist u. a. deshalb in der Statistischen Mechanik wichtig, weil er die Theorie der so genannten Gittergase zur Theorie der klassischen Spinmodelle in Beziehung setzt.

Im Augenblick ist der Zusammenhang zwischen \mathbb{Z}_2^k und E^k aber für uns deshalb interessant, weil er der Schlüssel zur Beantwortung der Frage nach der Darstellbarkeit der Energiefunktionen $H : E^k \rightarrow \mathbb{R}$ ist.

Wir können nämlich einen zweiten Isomorphismus $\psi_k : \mathbb{Z}_2^k \rightarrow \mathcal{P}_k$ zwischen der Gruppe \mathbb{Z}_2^k und der Potenzmenge $\mathcal{P}_k := 2^{\{1, \dots, k\}}$ von $\{1, \dots, k\}$ definieren, indem wir für $n = (n_1, \dots, n_k)$

$$\psi_k(n) := \{i \in \{1, \dots, k\} \mid n_i = 1\}$$

setzen. Damit erhält \mathcal{P}_k die Gruppenstruktur mit Multiplikation⁷

$$\Lambda_1 \cdot \Lambda_2 := \Lambda_1 \Delta \Lambda_2 \quad , \quad (\Lambda_1, \Lambda_2 \subseteq \{1, \dots, k\}).$$

Wegen der Isomorphien

$$E^k \xleftarrow{\varphi_k} \mathbb{Z}_2^k \xrightarrow{\psi_k} \mathcal{P}_k$$

sind auch E^k und \mathcal{P}_k isomorph. Wir wollen diese Isomorphie verwenden, um $H : E^k \rightarrow \mathbb{R}$ und $J : \mathcal{P}_k \rightarrow \mathbb{R}$ miteinander in Beziehung setzen.

Dazu benutzen wir die *Fouriertransformation auf \mathbb{Z}_2^k* , d. h. die lineare Abbildung $\mathcal{F}_k : \mathcal{A}_k \rightarrow \mathcal{A}_k$ der Observablenalgebra

$$\mathcal{A}_k := \{O : \mathbb{Z}_2^k \rightarrow \mathbb{R}\},$$

die für $O \in \mathcal{A}_k$ durch

$$(\mathcal{F}_k O)(t) := 2^{-k} \sum_{n \in \mathbb{Z}_2^k} O(n) \cdot (-1)^{n \cdot t} \quad (t \in \mathbb{Z}_2^k)$$

⁷ $\Lambda_1 \Delta \Lambda_2 = (\Lambda_1 \setminus \Lambda_2) \cup (\Lambda_2 \setminus \Lambda_1)$ ist die *symmetrische Differenz* der beiden Teilmengen Λ_1 und Λ_2 .

gegeben ist⁸. $n \cdot t := \sum_{i=1}^k n_i t_i \pmod{2}$ bezeichnet dabei das Skalarprodukt.
Wegen der Relation

$$2^{-k} \sum_{t \in \mathbb{Z}_2^k} (-1)^{l \cdot t} = \prod_{i=1}^k \left(\frac{1}{2} \sum_{t_i \in \mathbb{Z}_2} (-1)^{l_i t_i} \right) = \begin{cases} 1 & , l = 0 \\ 0 & , l \in \mathbb{Z}_2^k \setminus \{0\} \end{cases}$$

ist dann die inverse Fouriertransformation bis auf die Konstante gleich \mathcal{F}_k :

$$O(n) = \sum_{t \in \mathbb{Z}_2^k} (\mathcal{F}_k O)(t) \cdot (-1)^{n \cdot t} \quad (n \in \mathbb{Z}_2^k).$$

Schauen wir uns den Ausdruck $(-1)^{n \cdot t}$, $n, t \in \mathbb{Z}_2^k$ genauer an. Mit $\sigma := \varphi_k(n)$ und $\Lambda := \psi_k(t)$ gilt

$$(-1)^{n \cdot t} = \sigma_\Lambda,$$

denn

$$(-1)^{n \cdot t} = \prod_{i=1}^k (-1)^{n_i t_i} = \prod_{i \in \Lambda} (-1)^{n_i} = \prod_{i \in \Lambda} \varphi(n_i) = \sigma_\Lambda.$$

Daraus ergibt sich, dass eine Funktion

$$H : E^k \rightarrow \mathbb{R} \quad \text{der Form} \quad H(\sigma) = - \sum_{\Lambda \subseteq \{1, \dots, k\}} J(\Lambda) \sigma_\Lambda$$

die negative inverse Fouriertransformierte von $J : \mathcal{P}_k \rightarrow \mathbb{R}$ ist. Das negative Vorzeichen entspricht physikalischer Konvention. Umgekehrt ist J damit die negative Fouriertransformierte von H :

$$\boxed{J(\Lambda) = -2^{-k} \sum_{\sigma \in E^k} H(\sigma) \cdot \sigma_\Lambda.}$$

5.4 Bemerkung Wir können den Fall eines klassischen Spins, der in $r \in \mathbb{N}$ Richtungen weisen kann, in ähnlicher Weise wie den Fall $r = 2$ behandeln. Wir nummerieren dann zweckmäßigerweise die Einstellmöglichkeiten durch die additive Gruppe $E := \mathbb{Z}/r\mathbb{Z}$, mit Repräsentanten $E \cong \{0, \dots, r-1\}$. Die zu E duale Gruppe

$$\{\chi_l : E \rightarrow S^1 \mid l \in E\} \quad \text{mit} \quad \chi_l(m) := \exp(2\pi i l m / r)$$

⁸Diese Abbildung wird *Fouriertransformation* genannt, weil, analog zur Fouriertransformation auf dem \mathbb{R}^n , **1**) die Abbildungen $\mathbb{Z}_2^k \rightarrow S^1 \subseteq \mathbb{C}$, $n \mapsto (-1)^{n \cdot t}$ gerade die Gruppenhomomorphismen sind, und **2**) weil die Summation über alle $n \in \mathbb{Z}_2^k$ invariant unter beliebigen Verschiebungen $n \mapsto n + m$ ist, siehe Anhang B.

der Charaktere ist zu E isomorph, denn $\chi_l \chi_{l'} = \chi_{l+l'}$. Damit können wir mittels Fouriertransformation jede Funktion $H : E^k \rightarrow \mathbb{C}$ in der Form

$$H(\sigma) = - \sum_{l \in E^k} J(l) \chi_l(\sigma) \quad (\sigma \in E^k) \quad (5.1)$$

mit

$$\chi_l(\sigma) := \prod_{i=1}^k \chi_{l_i}(\sigma_i) = \exp\left(\frac{2\pi i}{r}(l, \sigma)\right) \quad (5.2)$$

und Wechselwirkungskoeffizienten

$$J(l) := -r^{-k} \sum_{\sigma \in E^k} H(\sigma) \chi_l(\sigma) \quad (l \in E^k)$$

darstellen. Setzt man $\Lambda(l) := \{i \in \{1, \dots, k\} \mid l_i \neq 0\}$, dann gilt in (5.2) $\chi_l(\sigma) = \prod_{i \in \Lambda(l)} \chi_{l_i}(\sigma_i)$, und (5.1), sortiert nach Gebieten Λ , schreibt sich in der Form

$$H(\sigma) = - \sum_{\Lambda \subseteq \{1, \dots, k\}} \sum_{l: \Lambda(l) = \Lambda} J(l) \chi_l(\sigma) \quad (\sigma \in E^k).$$

5.3 Der Konfigurationsraum eines unendlichen Spinsystems

In physikalischen Anwendungen der Theorie der Spinsysteme gehen wir oft davon aus, dass die Spins auf einem Gitter \mathbb{Z}^d angeordnet sind, wobei $d = 3$ der physikalisch wichtigste Fall ist, aber z. B. bei der Untersuchung von Oberflächen auch $d = 2$ vorkommt.

Der Raum E der Konfigurationen eines Spins sei für unsere Zwecke eine endliche Menge, im einfachsten Fall wieder $E = \{-1, 1\}$. Damit ist der Raum der Konfigurationen aller Spins auf dem Gitter gleich

$$\Omega := E^{(\mathbb{Z}^d)},$$

und wir notieren die Konfigurationen $\omega \in \Omega$ entsprechend in der Form

$$\omega = (\omega_l)_{l \in \mathbb{Z}^d}$$

mit $\omega_l \in E$ der Wert des Spins am Gitterpunkt l .

Um nun im Sinn von Kapitel 2.3 von Wahrscheinlichkeitsmaßen auf Ω sprechen zu können, müssen wir eine σ -Algebra messbarer Mengen auswählen. Ähnlich wie im Fall des \mathbb{R}^n ist für unsere Zwecke die σ -Algebra 2^Ω aller Teilmengen von Ω zu groß.

Stattdessen wollen wir uns an eine (idealisierte) experimentelle Situation anlehnen. In dieser können wir zwar "mikroskopisch" die Werte endlich vieler Spins

gleichzeitig messen sowie "makroskopisch" gewisse Mittelwerte (wie die mittlere Magnetisierung), wir können aber nicht gleichzeitig alle Spins messen.

Unsere Herangehensweise ist nun, entsprechend diesen Beobachtungen zunächst auf Ω eine Topologie zu wählen, um dann die σ -Algebra der Borelmengen dieser Topologie zu benutzen.

Da wir den Wert jedes einzelnen Spins messen können, benutzen wir auf E einfach die *diskrete Topologie* $\mathcal{O} := 2^E$, d. h. jede Teilmenge von E ist offen.

Auf $\Omega = \prod_{l \in \mathbb{Z}^d} E$ benutzen wir nun die *Produkttopologie* (siehe z. B. JÄNICH [Ja], Kapitel VI). Nach Definition ist dies die größte⁹ Topologie, für die alle *Projektionen*

$$\pi_l : \Omega \rightarrow E \quad , \quad \omega \mapsto \omega_l \quad (l \in \mathbb{Z}^d)$$

stetige Abbildungen sind.

Mit anderen Worten sind für alle $l \in \mathbb{Z}^d$ und alle (automatisch offenen!) Teilmengen $U_l \subseteq E$ die Teilmengen

$$\pi_l^{-1}(U_l) = \{\omega \in \Omega \mid \omega_l \in U_l\} \quad (5.3)$$

von Ω offen, und damit für alle *endlichen* $\Lambda \subseteq \mathbb{Z}^d$ auch die dann endlichen Schnittmengen

$$\pi_\Lambda^{-1} \left(\prod_{l \in \Lambda} U_l \right) = \{\omega \in \Omega \mid \forall l \in \Lambda : \omega_l \in U_l\}. \quad (5.4)$$

Hierbei wurde die Projektion

$$\pi_\Lambda : \Omega \rightarrow E^\Lambda \quad , \quad \omega \mapsto (\omega_l)_{l \in \Lambda}$$

auf die Teilkonfiguration auf $\Lambda \subseteq \mathbb{Z}^d$ verwandt. Alle weiteren in der Produkttopologie offenen Mengen sind nun aber Vereinigungen von Mengen der Form (5.4), d. h. die Mengen (5.3) bilden eine *Subbasis*, die Mengen (5.4) eine *Basis*¹⁰ der Produkttopologie.

Wie können wir uns nun die Topologie auf Ω vorstellen? Schauen wir uns einfachheitshalber den Fall $E = \{-1, 1\}$ an (Für $|E| = 1$ ist $|\Omega| = 1$, also uninteressant, der Fall $2 < |E| < \infty$ ist dem Fall $|E| = 2$ analog).

⁹**Def.:** Eine Topologie \mathcal{O}_1 auf Ω heißt *größer* als eine Topologie \mathcal{O}_2 auf Ω , wenn $\mathcal{O}_1 \subseteq \mathcal{O}_2$ gilt, also \mathcal{O}_1 weniger offene Mengen aufweist als \mathcal{O}_2 .

¹⁰**Def.:** • Eine Menge $\mathcal{B} \subseteq \mathcal{O}$ offener Teilmengen eines topologischen Raumes (Ω, \mathcal{O}) heißt *Basis* der Topologie \mathcal{O} , wenn jede offene Menge $M \in \mathcal{O}$ Vereinigung von Mengen aus \mathcal{B} ist.

• Eine Menge $\mathcal{S} \subseteq \mathcal{O}$ heißt *Subbasis* von \mathcal{O} , wenn jede offene Menge M Vereinigung endlicher Durchschnitte von Mengen aus \mathcal{S} ist.

5.5 Satz $\Omega = E^{\mathbb{Z}^d}$ mit der Produkttopologie \mathcal{O} ist homöomorph¹¹ zur Cantormenge $C \subseteq [0, 1]$.

5.6 Bemerkung Die Cantormenge C entsteht dadurch, dass man das mittlere Drittel $(\frac{1}{3}, \frac{2}{3})$ aus dem Intervall $[0, 1]$ entfernt und Gleiches induktiv für alle Teilintervalle tut, d. h.

$$C = \left\{ x \in [0, 1] \mid x = 2 \sum_{n=1}^{\infty} k_n 3^{-n} \text{ mit } k_n \in \{0, 1\} \right\}.$$

Der topologische Raum C mit der von \mathbb{R} geerbten Teilraumtopologie ist kompakt und jeder Punkt aus C ist Häufungspunkt von C und zugleich Randpunkt.

Bew.:

- Wir können die Gitterpunkte aus \mathbb{Z}^d abzählen, d. h. es existiert eine Bijektion $\varphi : \mathbb{N} \rightarrow \mathbb{Z}^d$. Beispielsweise beginnt man mit $\varphi(1) = 0$, nummeriert dann die Gitterpunkte $l \in \mathbb{Z}^d$ mit Abstand $\|l\|_1 = 1$ etc.
- Damit ist aber Ω homöomorph zu $\tilde{\Omega} := E^{\mathbb{N}}$ mit der Produkttopologie. Die Abbildung

$$H : \tilde{\Omega} \rightarrow C \quad , \quad \omega \mapsto 2 \sum_{n=1}^{\infty} \frac{\omega_n + 1}{2} 3^{-n}$$

ist eine Bijektion ($y \mapsto \frac{y+1}{2}$ bildet ja $E = \{-1, 1\}$ auf $\{0, 1\}$ ab).

- Um nachzuweisen, dass H ein Homöomorphismus ist, müssen wir überprüfen, ob Bilder offener Mengen in $\tilde{\Omega}$ und Urbilder offener Mengen in C wieder offen sind. Dazu genügt es, Basen zu betrachten. Die offenen Intervalle bilden bekanntlich eine Basis der Topologie von \mathbb{R} , deren Schnitt mit C also eine Basis der Topologie von C .

Umgekehrt bilden die offenen Mengen

$$Z_k(\sigma) := \{\omega \in \tilde{\Omega} \mid \omega_l = \sigma_l, \quad l \leq k\} \quad (k \in \mathbb{N}, \quad \sigma \in E^k)$$

eine Basis der Produkttopologie von $\tilde{\Omega}$.

Der Nachweis der Offenheit von $H(Z_k(\sigma)) \subseteq C$ bzw. $H^{-1}(I \cap C)$ für die offenen Intervalle $I \subseteq \mathbb{R}$ sei dem Leser überlassen. \square

¹¹**Def.:** • Eine Abbildung $f : A \rightarrow B$ zwischen topologischen Räumen heißt *Homöomorphismus*, wenn sie bijektiv und stetig ist, und auch $f^{-1} : B \rightarrow A$ stetig ist.

• Zwei topologische Räume A, B heißen *homöomorph*, wenn es einen Homöomorphismus $f : A \rightarrow B$ gibt.

- 5.7 Bemerkungen**
1. Dass die Produkttopologie auf Ω von der diskreten Topologie verschieden ist, sieht man z. B. daran, dass einelementige Mengen $\{\omega\} \subseteq \Omega$ nicht offen sind. Entsprechend ist die charakteristische Funktion $\mathbb{1}_\omega : \Omega \rightarrow \{0, 1\}$ nicht stetig.
 2. Im Gegensatz zur diskreten Topologie auf Ω wird $\Omega = E^{\mathbb{Z}^d}$ mit der Produkttopologie zu einem kompakten Raum. Dies gilt nach dem Satz von Tychonoff¹² immer dann, wenn (wie angenommen) der Raum E kompakt ist.
 3. Andererseits ist die Topologie fein genug, um die Spinkonfigurationen voneinander zu trennen: Ω ist ein Hausdorffraum. Denn für Spinkonfigurationen $\omega^{(1)} \neq \omega^{(2)} \in \Omega$ existiert ein Gitterpunkt $k \in \mathbb{Z}^d$ mit unterschiedlichen Werten des Spins: $\omega_k^{(1)} \neq \omega_k^{(2)}$. Damit sind die $\pi_k^{-1}(\omega_k^{(i)}) \subseteq \Omega$ Umgebungen von $\omega^{(i)}$ mit

$$\pi_k^{-1}(\omega_k^{(1)}) \cap \pi_k^{-1}(\omega_k^{(2)}) = \emptyset.$$

Wir benutzen nun auf Ω die σ -Algebra der Borelmengen.

5.4 Die Wechselwirkung eines unendlichen Spinsystems

Ein Wechselwirkungspotential auf $\Omega = E^{\mathbb{Z}^d}$ ist durch Angabe der Wechselwirkungskoeffizienten $J(\Lambda)$, endlicher Teilmengen $\Lambda \in \mathcal{S}(d)$ des Gitters, mit

$$\mathcal{S} \equiv \mathcal{S}(d) := \{\Lambda \subseteq \mathbb{Z}^d \mid 0 < |\Lambda| < \infty\}$$

fixiert. Bei Bedarf setzen wir J mit Null zu einer Funktion $J : 2^{\mathbb{Z}^d} \rightarrow \mathbb{R}$ auf der Potenzmenge von \mathbb{Z}^d fort. Oft gehen wir davon aus, dass das Potential *translationsinvariant* ist, d.h., dass

$$J(\Lambda + a) = J(\Lambda) \quad \text{für } a \in \mathbb{Z}^d$$

gilt (dabei ist $\Lambda + a := \{\ell \in \mathbb{Z}^d \mid \ell - a \in \Lambda\}$).

Natürlich ist es in dieser Situation unmöglich, eine Gesamtenergie des (unendlichen) Spinsystems etwa durch

$$"H(\sigma) = - \sum_{\Lambda \subseteq \mathbb{Z}^d} J(\Lambda) \sigma_\Lambda "$$

zu definieren, denn eine solche Summe divergiert. Wir erwarten ja auch, dass die Gesamtenergie eines unendlich ausgedehnten Kristalls divergiert.

¹² **Satz von Tychonoff:** Beliebige Produkte kompakter topologischer Räume sind in der Produkttopologie kompakt (siehe z.B. JÄNICH [Ja], Kapitel X).

Stattdessen können wir Energiefunktionen $H_\Lambda : E^\Lambda \rightarrow \mathbb{R}$ für die *endlichen* Teilmengen $\Lambda \subseteq \mathbb{Z}^d$ unseres Gitters durch

$$H_\Lambda(\sigma) := - \sum_{\Lambda' \subseteq \Lambda} J(\Lambda') \sigma_{\Lambda'}$$

definieren. Wir werden uns dann dafür interessieren, wie sich das durch H_Λ definierte Gibbsmaß bei Vergrößerung von $\Lambda \subseteq \mathbb{Z}^d$ verhält.

In der obigen Definition einer Energiefunktion für das Teilgebiet $\Lambda \subseteq \mathbb{Z}^d$ haben wir nur Wechselwirkungen zwischen Spins innerhalb Λ berücksichtigt. Man spricht hier von *freien Randbedingungen*.

Wir können uns aber auch fragen, wie die Spins in Λ durch die Spins im Komplement $\Lambda^c := \mathbb{Z}^d \setminus \Lambda$ beeinflusst werden. Sei $\tau \in E^{\Lambda^c}$ eine Konfiguration der Spins in Λ^c . Dann ist für $\sigma \in E^\Lambda$

$$(\sigma, \tau) \in E^\Lambda \times E^{\Lambda^c} \cong E^{\mathbb{Z}^d}$$

eine Konfiguration auf dem gesamten Gitter.

Setzen wir $H_\Lambda^\tau : E^\Lambda \rightarrow \mathbb{R}$ gleich

$$H_\Lambda^\tau(\sigma) := - \sum_{\Lambda' \in \mathcal{S}: \Lambda' \cap \Lambda \neq \emptyset} J(\Lambda') \sigma_{\Lambda' \cap \Lambda} \tau_{\Lambda' \cap \Lambda^c}, \quad (5.5)$$

so berücksichtigt diese Energiefunktion auch die Wechselwirkung zwischen Spins in Λ und Spins in Λ^c , siehe Abb. 5.1. Andererseits ist nun nicht mehr klar, dass die jetzt im Allgemeinen unendliche Summe konvergiert. Wir werden auf diese Frage zurückkommen.

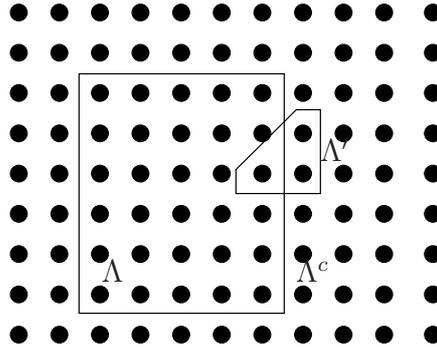


Abbildung 5.1: Energiefunktion $H_\Lambda^\tau : E^\Lambda \rightarrow \mathbb{R}$ mit Randbedingungen $\tau \in E^{\Lambda^c}$ und Wechselwirkungen in Λ'

Wählen wir z. B. die Extremfälle $\tau_i := 1$ für alle $i \in \Lambda^c$ bzw. $\tau_i = -1$ für alle $i \in \Lambda^c$, so können wir die Frage stellen, inwieweit diese *Randbedingungen* eine mittlere Ausrichtung der Spins in Λ auch im thermodynamischen Limes

$|\Lambda| \rightarrow \infty$ bewirken können. Zur Zusammenfassung und Vorbereitung auf folgende Kapitel definieren wir jetzt den Begriff des Wechselwirkungspotentials für klassische Spinsysteme.

5.8 Definition • *Ein (Wechselwirkungs-) Potential auf \mathbb{Z}^d ist eine Abbildung $J : \mathcal{S}(d) \rightarrow \mathbb{R}$ mit der Eigenschaft*

$$\|J\| := \sup_{\ell \in \mathbb{Z}^d} \sum_{\Lambda \in \mathcal{S}: \ell \in \Lambda} \frac{|J(\Lambda)|}{|\Lambda|} < \infty. \quad (5.6)$$

• *Der Durchmesser $\text{diam}(\Lambda)$ von $\Lambda \in \mathcal{S}(d)$ ist*

$$\text{diam}(\Lambda) := \max_{k, \ell \in \Lambda} d(k, \ell) \quad \text{mit} \quad d(k, \ell) := \|k - \ell\|_1 = \sum_{i=1}^d |k_i - \ell_i|.$$

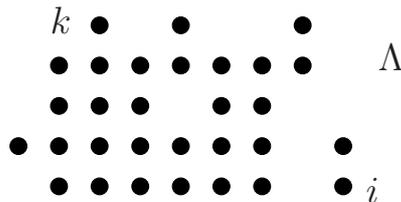


Abbildung 5.2: $\Lambda \subseteq \mathbb{Z}^2$ mit $\text{diam}(\Lambda) = d(i, k) = 10$.

• *Ein Potential J hat endliche Reichweite R , wenn*

$$R := \sup\{\text{diam}(\Lambda) \mid \Lambda \in \mathcal{S}, J(\Lambda) \neq 0\} < \infty.$$

• *Ein Paarpotential J ist ein Potential mit $J(\Lambda) = 0$ für $|\Lambda| > 2$.*

• *Ein Nächste-Nachbar-Potential ist ein Paarpotential mit Reichweite $R \leq 1$.*

• *Ein Potential J heißt translationsinvariant, wenn*

$$J(\Lambda + a) = J(\Lambda) \quad (\Lambda \in \mathcal{S}, a \in \mathbb{Z}^d).$$

• *J heißt ferromagnetisch, wenn $J \geq 0$.*

5.9 Bemerkungen 1. Im Gegensatz zur Potenzmenge $2^{\mathbb{Z}^d}$ von \mathbb{Z}^d ist deren Teilmenge $\mathcal{S}(d)$ abzählbar.

2. Die definierende Bedingung (5.6) für ein Wechselwirkungspotential hat zur Konsequenz, dass die Energie pro Teilchen immer endlich ist. Denn betrachten wir den Term

$$-J(\Lambda) \cdot \sigma_\Lambda,$$

so ist dieser Energiebeitrag auf alle Teilchen in Λ zu verteilen.

Diese physikalisch sinnvolle Bedingung ist, wie sich zeigen lässt, auch mathematisch notwendig für die Existenz eines thermodynamischen Limes.

3. Wenn wir die Endlichkeit der folgenden Norm des Potentials voraussetzen, können wir sicherstellen, dass die Energiefunktionen (5.5) mit Randbedingungen τ wohldefiniert sind:

$$\|J\| := \sup_{\ell \in \mathbb{Z}^d} \sum_{\Lambda \in \mathcal{S}(d): \ell \in \Lambda} |J(\Lambda)|. \quad (5.7)$$

4. Da $\Lambda \neq \emptyset$ gefordert wird, ist der Energiemittelwert $2^{-|\Lambda|} \sum_{\sigma \in E^\Lambda} H_\Lambda(\sigma) = 0$. Das ist eine praktische Normierung, denn das Gibbsmaß zu H_Λ ist ohnehin unabhängig vom Mittelwert.

Die Menge

$$\mathcal{J} \equiv \mathcal{J}(d) := \{J : \mathcal{S}(d) \rightarrow \mathbb{R} \mid J \text{ translationsinvariantes Potential}\} \quad (5.8)$$

bildet einen \mathbb{R} -Vektorraum (bezüglich punktweiser Addition und Multiplikation mit Skalaren). Auf diesem Raum wird durch (5.6) eine Norm definiert, die ihn zum Banachraum macht.

5.10 Beispiele 1. **Isingmodell:** Für Parameter $(j, h) \in \mathbb{R}^2$ und $d \in \mathbb{N}$ heißt

$$J : \mathcal{S}(d) \rightarrow \mathbb{R} \quad , \quad J(\Lambda) := \begin{cases} j & , \Lambda = \{k, \ell\} \text{ mit } \|k - \ell\|_1 = 1 \\ h & , \Lambda = \{k\} \\ 0 & , \text{sonst} \end{cases}$$

d-dimensionales Isingmodell mit Wechselwirkungsstärke *j* und Magnetfeld *h*. Es wurde 1920 von Wilhelm Lenz erfunden und 1924 von dessen Doktoranden Ernst Ising zunächst in einer Dimension genauer studiert.

Der *antiferromagnetische* Fall $j < 0$, $h = 0$ geht unter der Bijektion

$$U : \Omega \rightarrow \Omega \quad , \quad U(\omega)_\ell := (-1)^{\sum_{i=1}^d \ell_i} \omega_\ell \quad (5.9)$$

in den ferromagnetischen mit Parametern $(-j, 0)$ über, denn es gilt

$$U(\omega)_k U(\omega)_\ell = -\omega_k \omega_\ell \quad \text{falls} \quad \|k - \ell\|_1 = 1.$$

2. **Pottsmodell:** Ist der Spin E r -elementig, dann lässt sich Definition 5.8 folgendermaßen modifizieren. Man identifiziert E wie in Bemerkung 5.4 mit der Gruppe $\mathbb{Z}/r\mathbb{Z}$ und setzt

$$\mathcal{S}_r(d) := \{l \in E^{\mathbb{Z}^d} \mid 0 < |\Lambda(l)| < \infty\},$$

mit dem Wechselwirkungsgebiet $\Lambda(l) := \{k \in \mathbb{Z}^d \mid l_k \neq 0\}$. Für Wechselwirkungspotentiale $J : \mathcal{S}_r(d) \rightarrow \mathbb{C}$ fordert man analog zu (5.6)

$$\|J\| := \sup_{i \in \mathbb{Z}^d} \sum_{\substack{\Lambda \in \mathcal{S} \\ \Lambda \ni i}} \sum_{l: \Lambda(l)=\Lambda} \frac{|J(l)|}{|\Lambda| \cdot (r-1)^{|\Lambda|}} < \infty.$$

Ein wichtiges Beispiel für ein Nächste-Nachbar-Potential ist das sog. *Pottsmodell* mit Energiefunktion für $\Lambda \in \mathcal{S}_r(d)$ und Parameter $J \in \mathbb{R}$

$$H_\Lambda(\sigma) = -J \sum_{\{j,k\} \subseteq \Lambda, \|j-k\|=1} \delta(\sigma_j, \sigma_k) \quad (\sigma \in E^\Lambda).$$

Für $(r=2)$ -wertige Spins ist dies zum Isingmodell (ohne äußeres Magnetfeld) isomorph.

5.5 Wahrscheinlichkeitsmaße für unendliche Spinsysteme

Wir betrachten wieder ein klassisches Spinsystem auf dem Gitter \mathbb{Z}^d , wobei die einzelnen Spins Werte in einer endlichen Menge E annehmen können. Den Produktraum $\Omega = E^{\mathbb{Z}^d}$ versehen wir mit der in Kapitel 5.3 beschriebenen σ -Algebra \mathcal{F} . Wir fragen uns nun, wie wir praktisch Wahrscheinlichkeitsmaße $\mathbb{P} : \mathcal{F} \rightarrow [0, 1]$ angeben können. Insbesondere werden wir uns für die Gibbsmaße der in Kapitel 5.4 beschriebenen Wechselwirkung J interessieren.

Ähnlich wie bei den in Kapitel 2.3 diskutierten Gibbsmaßen \mathbb{P} auf dem Phasenraum $\Omega = \mathbb{R}^n$ ist es unmöglich, diese Wahrscheinlichkeitsmaße durch Angabe der Wahrscheinlichkeiten $\mathbb{P}(\{\omega\})$ der Elementarereignisse $\omega \in \Omega$ zu beschreiben, denn Ω ist überabzählbar, und typischerweise ist $\mathbb{P}(\{\omega\}) \equiv 0$.

Auch das in Kapitel 2.3 benutzte Konzept der Dichte $\frac{\exp(-\beta H)}{Z(\beta)} : \Omega \rightarrow \mathbb{R}^+$ lässt sich nicht auf unsere Situation übertragen, da eine Energiefunktion $H : \Omega \rightarrow \mathbb{R}$ ja für das unendliche Spinsystem nicht existiert.

Andererseits hilft uns hier die Definition der σ -Algebra \mathcal{F} von Ereignissen. Für alle $\Lambda \in \mathcal{S}(d)$ und Spinkonfigurationen $\sigma \in E^\Lambda$ ist $\pi_\Lambda^{-1}(\sigma) \in \mathcal{F}$, und die Zylindermengen $\pi_\Lambda^{-1}(\sigma)$ erzeugen \mathcal{F} . Damit genügt es, die Wahrscheinlichkeiten $\mathbb{P}(\pi_\Lambda^{-1}(\sigma))$ des Auftretens aller *endlichen* Spinkonfigurationen σ zu kennen, um \mathbb{P} festzulegen! Dies folgt aus dem Satz von Kolmogorov, siehe z. B. BAUER [Ba], § 35.

Viele, aber nicht alle in der Statistischen Mechanik von Spingittern mit translationsinvariantem Potential auftretenden Gibbsmaße sind translationsinvariant:

5.11 Definition Ein Wahrscheinlichkeitsmaß \mathbb{P} auf $\Omega = E^{\mathbb{Z}^d}$ heißt **translationsinvariant** wenn für die Translationen

$$T_\ell : \Omega \rightarrow \Omega, \quad (T_\ell \omega)_k := \omega_{k-\ell} \quad (\ell \in \mathbb{Z}^d)$$

gilt: $\mathbb{P}(T_\ell(A)) = \mathbb{P}(A)$ für jede messbare Menge $A \subset \Omega$ und alle $\ell \in \mathbb{Z}^d$.

5.6 Mikroskopische und Makroskopische Observable

Für endliche Teilchensysteme ist die Grenze zwischen mikroskopischen und makroskopischen Geschehen fließend. Nicht so im thermodynamischen Limes. Um dies besser zu verstehen, schauen wir uns die einer nicht notwendig endlichen Teilmenge $U \subseteq \mathbb{Z}^d$ des Gitters zugeordnete Unter- σ -Algebra

$$\mathcal{F}_U \subseteq \mathcal{F}$$

an, die von den Zylindermengen

$$\pi_\Lambda^{-1}(Z) \subseteq \Omega \quad \text{mit} \quad \Lambda \subseteq U, \quad \Lambda \in \mathcal{S}(d), \quad Z \subseteq E^\Lambda$$

erzeugt wird.

Für endliche Mengen U von Gitterpunkten ist $\mathcal{F}_U \cong 2^U$, und \mathcal{F}_U enthält gerade die durch die Spins in U determinierten Ereignisse.

Hier sind wir aber im Gegenteil für $\Lambda \in \mathcal{S}(d)$ an der σ -Algebra $\mathcal{F}_{\mathbb{Z}^d \setminus \Lambda} \subseteq \mathcal{F}$ interessiert, deren Ereignisse *nicht* von den Spins in Λ abhängen.

5.12 Definition • Die σ -Algebra bei Unendlich ist

$$\mathcal{T} := \bigcap_{\Lambda \in \mathcal{S}(d)} \mathcal{F}_{\mathbb{Z}^d \setminus \Lambda}.$$

Die Ereignisse in \mathcal{T} heißen **makroskopisch**.

- Ist eine Funktion $f : \Omega \rightarrow \mathbb{R}$ bez. \mathcal{T} messbar, dann nennt man f **makroskopische Observable**.

Oft werden makroskopische Observable als Limiten von Spin-Mittelwerten auf aufsteigenden $(\Lambda_{n+1} \supseteq \Lambda_n)$ Folgen von $\Lambda_n \in \mathcal{S}(d)$ definiert.

5.13 Beispiele • Für $n \in \mathbb{N}$ ist $\Lambda_n := \{-n, \dots, n\}^d \in \mathcal{S}(d)$, und die *mittlere Magnetisierung*

$$m : \Omega \rightarrow [-1, 1] \quad , \quad m(\omega) := \begin{cases} \lim_{n \rightarrow \infty} \frac{1}{|\Lambda_n|} \sum_{k \in \Lambda_n} \omega_k & , \text{ falls Limes ex.} \\ 0 & , \text{ sonst.} \end{cases} \quad (5.10)$$

Dann ist m eine makroskopische Variable, denn sie ändert ihren Wert nicht beim Umlapp endlich vieler ω_k . Die Ereignisse $m^{-1}(I)$ für Intervalle $I \subset [0, 1]$ liegen in \mathcal{T} . Da in den Anwendungen die Menge der ω , für die der Limes in (5.10) nicht existiert, Gibbsmaß Null besitzt, kann man ohne Veränderung von Erwartungswerten m z.B. auch als $\limsup_{n \rightarrow \infty}$ definieren.

- Für Dimension $d = 3$ und $k \in \mathbb{Z}$ betrachten wir die in der k -ten Schicht liegenden Spins. Für $\Lambda_{n,k} := \{-n, \dots, n\} \times \{-n, \dots, n\} \times \{k\}$ ist

$$m_k : \Omega \rightarrow [-1, 1] \quad , \quad m_k(\omega) = \limsup_{n \rightarrow \infty} \frac{1}{|\Lambda_{n,k}|} \sum_{\ell \in \Lambda_{n,k}} \omega_\ell$$

die mittlere Magnetisierung *in dieser Schicht*. Diese makroskopischen Observablen besitzen für nicht translationsinvariante Gibbsmaße des Isingmodells k -abhängige Erwartungswerte (siehe Kapitel 8.3).

- Für beliebige Dimensionen d die

$$\Lambda_n := \left\{ k \in \{-n, \dots, n\}^d \mid \sum_{i=1}^d k_i \text{ gerade} \right\}$$

und die analog zu (5.10) definierte mittlere Magnetisierung des Untergitters $\{\ell \in \mathbb{Z}^d \mid \sum_{i=1}^d \ell_i \in 2\mathbb{Z}\} \subseteq \mathbb{Z}^d$. Diese makroskopische Observable wird bei der Analyse der antiferromagnetischen Isingmodelle benutzt, siehe Bem. 9.17.

Wie diese Beispiele zeigen, ist die σ -Algebra bei Unendlich erstaunlicherweise sehr reichhaltig.

Die makroskopischen Observablen f sind aber, soweit sie nicht konstant sind, *nicht stetig*, denn ist $f(\sigma) \neq f(\omega)$, dann findet man in jeder σ enthaltenden Zylindermenge ein $\sigma' \in \Omega$ mit $f(\sigma') = f(\omega)$.

5.14 Definition Die stetigen Funktionen $f \in C(\Omega)$ heißen **mikroskopische Observablen**.

Beispiele mikroskopischer Observablen sind die so genannten *Korrelationsfunktionen* für $\Lambda \in \mathcal{S}(d)$

$$S_\Lambda : \Omega \rightarrow \{-1, 1\} \quad , \quad S_\Lambda(\omega) := \prod_{k \in \Lambda} \omega_k.$$

5.15 Aufgabe Zeigen Sie, dass eine Observable $f : \Omega \rightarrow \mathbb{C}$ für $\Omega = E^{\mathbb{Z}^d}$, $E = \{-1, 1\}$ genau dann stetig ist, wenn sie *quasilokal* ist, d.h. es eine Folge von lokalen Funktionen $f_k : \Omega \rightarrow \mathbb{C}$ gibt mit

$$\lim_{k \rightarrow \infty} \sup_{\omega \in \Omega} |f_k(\omega) - f(\omega)| = 0.$$

Eine Funktion $g : \Omega \rightarrow \mathbb{C}$ heißt dabei *lokal*, wenn es ein $\Lambda \in \mathcal{S}(d)$ gibt mit

$$g(\sigma, \tau) = g(\sigma, \tau') \quad \text{für alle } (\sigma, \tau), (\sigma, \tau') \in E^\Lambda \times E^{\Lambda^c}.$$

Tip: Zeigen Sie, dass in beiden Fällen für f gilt: Für alle $\varepsilon > 0$ existiert ein $\Lambda \in \mathcal{S}(d)$ mit

$$\sup_{\sigma \in E^\Lambda; \tau, \tau' \in E^{\Lambda^c}} |f(\sigma, \tau) - f(\sigma, \tau')| < \varepsilon$$

6 Thermodynamischer Limes der Freien Energie

6.1 Bedeutung der Freien Energie	60
6.2 Der van-Hove-Limes	62
6.3 Limes für kubische Gebiete	64
6.4 Limes für beliebige Gebiete	67
6.5 Die Ising-Spinkette	71

Der thermodynamische Limes ist der Limes unendlicher Teilchenzahl. Konkreter interessieren wir uns bei gegebener Temperatur für den thermodynamischen Limes des Gibbszustandes eines Systems.

Wie wir gesehen haben, ist in der klassischen wie auch in der Quantenmechanik ein Zustand ein positives identitätserhaltendes lineares Funktional auf der Algebra der Observablen. Im klassischen Fall entsprechen den Zuständen Wahrscheinlichkeitsmaße, bezüglich derer dann der Erwartungswert einer Observablen gebildet wird. In der Quantenmechanik entsprechen den (normalen) Zuständen Dichtematrizen.

In beiden Fällen ist zunächst unklar, in welchem Sinn ein thermodynamischer Limes von Zuständen überhaupt zu verstehen ist, da diese für verschiedene Teilchenzahlen auf verschiedenen Räumen definiert sind. Wir werden auf diese Frage in Kapitel 7.4 zurückkommen, uns aber jetzt einer einfacheren zuwenden: Dem thermodynamischen Limes der Freien Energie.

6.1 Bedeutung der Freien Energie

In der Thermodynamik wird eine Reihe von Größen eingeführt, die die Dimension einer Energie besitzen, z. B. die Freie Energie und die Enthalpie.

Der Grund für diese vielleicht verwirrende Vielfalt von Energiebegriffen ist in der Tatsache zu suchen, dass verschiedene Arten, reversibel den Zustand des Systems zu verändern, verschieden viel Energie kosten. Die Freie Energie beispielsweise misst die bei einer *isothermen* (also bei konstanter Temperatur vorgenommenen) Zustandsveränderung geleistete Arbeit, während die Enthalpie entsprechendes für eine *isobare* (also bei konstantem Druck vorgenommene) Zustandsänderung leistet.

6.1 Definition Die **Freie Energie** F eines (klassischen oder quantenmechanischen) Systems bei inverser Temperatur $\beta > 0$ ist

$$F(\beta) := -\frac{1}{\beta} \ln Z(\beta),$$

wobei $Z(\beta)$ die Zustandssumme bezeichnet.

6.2 Bemerkungen 1. Klassisch ergibt sich damit für endliche Spinsysteme

$$\exp(-\beta F(\beta)) = \sum_{\omega \in \Omega} e^{-\beta H(\omega)}$$

bzw. für Energiefunktionen $H : \Omega \rightarrow \mathbb{R}$ auf allgemeinen Meßräumen Ω mit a-priori-Maß λ

$$\exp(-\beta F(\beta)) = \int_{\Omega} e^{-\beta H(\omega)} d\lambda(\omega),$$

quantenmechanisch

$$\exp(-\beta F(\beta)) = \text{tr}(e^{-\beta H}).$$

2. Betrachtet man Systeme mit Teilchenzahl $k \in \mathbb{N}$ und den thermodynamischen Limes $k \rightarrow \infty$, so ist es sinnvoll, zur Freien Energie pro Teilchen $F_k(\beta) := -\frac{1}{k\beta} \ln Z_k(\beta)$ überzugehen. Diese Größe besitzt dann typischerweise einen Limes, während die Freie Energie des gesamten Systems eine extensive, also asymptotisch proportional zu k wachsende Größe sein wird.

Die Kenntnis der Temperaturabhängigkeit der Freien Energie erlaubt viele Rückschlüsse auf das Verhalten des betrachteten Systems. Beispielsweise gilt der

6.3 Satz Die Freie Energie F eines selbstadjungierten Operators $H \in B(\mathcal{H})$ auf einem endlich-dimensionalen Hilbertraum \mathcal{H} besitzt folgende Eigenschaften:

1. $F(\beta) = \langle H \rangle (\beta) - T \cdot S(\beta)$, $T = 1/\beta$,
2. $\frac{d}{d\beta}(\beta F(\beta)) = \langle H \rangle (\beta)$,
3. $\frac{d^2}{d\beta^2}(\beta F(\beta)) \leq 0$.

6.4 Bemerkung Die analoge Aussage für Energiefunktionen $H : \Omega \rightarrow \mathbb{R}$ endliche Wahrscheinlichkeitsräume Ω folgt wieder durch Interpretation von H als Multiplikationsoperator auf dem Hilbertraum \mathbb{C}^Ω .

Ist der klassische Phasenraum Ω hingegen eine Mannigfaltigkeit, z. B. der \mathbb{R}^n , so kann man (bei Konvergenz) analoge Aussagen zeigen, wenn man Summen durch Integrale ersetzt.

Bew.:

1. Wegen $F(\beta) = -\frac{1}{\beta} \ln Z(\beta)$ und $\langle H \rangle (\beta) = \frac{\text{tr}(He^{-\beta H})}{Z(\beta)}$ ist

$$\begin{aligned} -TS(\beta) &= \frac{1}{\beta} \text{tr} \left(\frac{e^{-\beta H}}{Z(\beta)} \ln \left(\frac{e^{-\beta H}}{Z(\beta)} \right) \right) \\ &= \text{tr} \left(\frac{e^{-\beta H}}{Z(\beta)} \cdot (-H) \right) - \frac{1}{\beta} \frac{\ln(Z(\beta))}{Z(\beta)} \cdot \text{tr}(e^{-\beta H}) \\ &= -\langle H \rangle (\beta) - \frac{1}{\beta} \ln Z(\beta). \end{aligned}$$

2. $\frac{d}{d\beta}(\beta F(\beta)) = -\frac{d}{d\beta} \ln Z(\beta) = \frac{\text{tr}(He^{-\beta H})}{Z(\beta)} = \langle H \rangle (\beta)$.

3. Unter Verwendung von 2) berechnen wir für die Dichtematrix $\rho_\beta = \frac{e^{-\beta H}}{Z(\beta)}$

$$\frac{d}{d\beta} \langle H \rangle (\beta) = \frac{d}{d\beta} \frac{\text{tr}(e^{-\beta H} H)}{Z(\beta)} = \frac{-\text{tr}(H^2 e^{-\beta H}) Z(\beta) + [\text{tr}(H e^{-\beta H})]^2}{Z^2(\beta)}.$$

Dies ist gleich $\text{tr}(\rho_\beta H)^2 - \text{tr}(\rho_\beta) \text{tr}(\rho_\beta H^2)$, also nach der Cauchy-Schwarz-Ungleichung ≤ 0 . \square

Der letzte Teil des Satzes impliziert, dass $\beta \mapsto \beta F(\beta)$ eine konkave Funktion ist. Diese Konkavitätseigenschaft wird sich im thermodynamischen Limes auch dann erhalten, wenn F nicht mehr überall nach β differenzierbar ist, weil Phasenübergänge vorkommen.

Diese Konkavität ist nach Satz 6.3.2 äquivalent zu der Aussage, dass der Energieerwartungswert $\langle H \rangle (1/T)$ monoton mit der Temperatur T wächst.

6.2 Der van-Hove-Limes

Wir wollen jetzt die Frage beantworten, ob die Freie Energie pro Teilchen F_k einen thermodynamischen Limes besitzt.

Wir betrachten also ein translationsinvariantes Potential $J : \mathcal{S}(d) \rightarrow \mathbb{R}$ auf dem Gitter \mathbb{Z}^d und für $\Lambda \in \mathcal{S}(d)$ die zugehörigen Energiefunktionen

$$H_\Lambda : E^\Lambda \rightarrow \mathbb{R} \quad , \quad H_\Lambda(\sigma) = - \sum_{\Lambda' \subseteq \Lambda} J(\Lambda') \sigma_{\Lambda'}$$

(wir könnten auch die Energiefunktionen H_Λ^τ mit Randbedingung $\tau \in E^{\Lambda^c}$ betrachten). Die zugehörige Freie Energie pro Teilchen ist damit

$$F_\Lambda(\beta) := -\frac{1}{\beta|\Lambda|} \ln \left(\sum_{\sigma \in E^\Lambda} e^{-\beta H_\Lambda(\sigma)} \right)$$

mit dem "Volumen" $|\Lambda|$ von Λ .

Um die Existenz des thermodynamischen Limes zu garantieren, müssen wir von betrachteten Folgen $(\Lambda_k)_{k \in \mathbb{N}}$ von Gebieten $\Lambda_k \in \mathcal{S}$ mehr verlangen als dass $\lim_{k \rightarrow \infty} |\Lambda_k| = \infty$, dass also das Volumen gegen unendlich geht.

Wir müssen gleichzeitig verlangen, dass mit

$$d(\ell, M) := \min_{m \in M} \|\ell - m\|_1 \quad (\ell \in \mathbb{Z}^d, \emptyset \neq M \subseteq \mathbb{Z}^d)$$

das Volumen der Teilmenge

$$V_h(\Lambda) := |\{\ell \in \Lambda \mid d(\ell, \Lambda^c) \leq h\}| \quad (h \in \mathbb{N})$$

von Λ , deren Abstand zum Außengebiet $\Lambda^c = \mathbb{Z}^d \setminus \Lambda$ kleiner als ein vorgegebenes h ist, nicht zu schnell wächst.

6.5 Definition • Eine Folge $(\Lambda_k)_{k \in \mathbb{N}}$ von $\Lambda_k \in \mathcal{S}(d)$ heißt **van Hove-Folge**, wenn

$$\lim_{k \rightarrow \infty} |\Lambda_k| = \infty \quad \text{und} \quad \lim_{k \rightarrow \infty} \frac{V_h(\Lambda_k)}{|\Lambda_k|} = 0 \quad (h \in \mathbb{N}).$$

• Existiert für eine Funktion $G : \mathcal{S}(d) \rightarrow \mathbb{C}$ und jede van Hove-Folge $(\Lambda_k)_{k \in \mathbb{N}}$ der Limes $\lim_{k \rightarrow \infty} G(\Lambda_k)$ und ist dieser Wert unabhängig von der Folge, dann heißt er der **van Hove-Limes** oder **thermodynamische Limes** von G , in Zeichen

$$\lim_{\Lambda \rightarrow \infty} G(\Lambda).$$

6.6 Beispiel In \mathbb{Z}^2 bilden die Teilmengen $\Lambda_k := [0, k] \times [0, ak] \cap \mathbb{Z}^2$ für $a > 0$ eine van Hove-Folge, für $a = 0$ jedoch nicht.

6.7 Bemerkung Es reicht aus, die Bedingung $\lim_{k \rightarrow \infty} \frac{V_h(\Lambda_k)}{|\Lambda_k|} = 0$ für $h = 1$ zu verifizieren, denn dann gilt sie für beliebige $h \in \mathbb{N}$. Denn für $k \in \mathbb{N}$ hat jeder Gitterplatz $\ell \in \Lambda$ mit $d(\ell, \Lambda^c) = k$ höchstens 2^d Nachbarn $m \in \Lambda$ mit $d(m, \Lambda^c) = k + 1$, während jeder Gitterplatz $m \in \Lambda$ mit $d(m, \Lambda^c) = k + 1$ mindestens einen Nachbarn $\ell \in \Lambda$ mit $d(\ell, \Lambda^c) = k$ hat.

Wir werden sehen, dass der van-Hove-Limes $F = \lim_{\Lambda \rightarrow \infty} F_\Lambda$ der freien Energiedichte eines translationsinvarianten Potentials existiert. Die Beweismethode wird dabei sein, Energieabschätzungen durch Volumenabschätzungen in \mathbb{Z}^d zu ersetzen und auszunutzen, dass der Volumenanteil $\frac{V_h(\Lambda)}{|\Lambda|}$ randnaher Punkte im van-Hove-Limes verschwindet.

Als ersten Schritt zeigen wir

6.8 Lemma Sei $J : \mathcal{S}(d) \rightarrow \mathbb{R}$ ein Potential auf \mathbb{Z}^d mit der in (5.6) definierten Norm $\|J\|$. Dann gilt

$$\|H_\Lambda\|_{\max} \leq |\Lambda| \cdot \|J\| \quad (\Lambda \in \mathcal{S}).$$

Bew.: Mit $\|J\| = \sup_{\ell \in \mathbb{Z}^d} \sum_{\Lambda \in \mathcal{S}: \ell \in \Lambda} \frac{|J(\Lambda)|}{|\Lambda|}$ ist

$$\begin{aligned} \|H_\Lambda\|_{\max} &= \max_{\sigma \in E^\Lambda} |H_\Lambda(\sigma)| = \max_{\sigma \in E^\Lambda} \left| \sum_{\Lambda' \subseteq \Lambda} J(\Lambda') \sigma_{\Lambda'} \right| \leq \sum_{\Lambda' \subseteq \Lambda} |J(\Lambda')| \\ &= \sum_{i \in \Lambda} \sum_{\substack{\Lambda' \subseteq \Lambda \\ \Lambda' \ni i}} \frac{|J(\Lambda')|}{|\Lambda'|} \leq \sum_{i \in \Lambda} \sum_{\substack{\Lambda' \in \mathcal{S} \\ \Lambda' \ni i}} \frac{|J(\Lambda')|}{|\Lambda'|} \leq |\Lambda| \cdot \|J\|. \quad \square \end{aligned}$$

Das Besondere an dieser Abschätzung ist, dass sie proportional zur Größe $|\Lambda|$ des Gebiets Λ ist.

6.3 Limes für kubische Gebiete

Als nächstes zeigen wir für kubische Gebiete

$$\Lambda(a) := \{0, \dots, a-1\}^d \subseteq \mathbb{Z}^d \quad \text{der Kantenlänge } a \in \mathbb{N}$$

und translationsinvariante Potentiale die Existenz des thermodynamischen Limes

$$F := \lim_{a \rightarrow \infty} F_{\Lambda(a)}. \quad (6.1)$$

Wir werden dann allgemeine Gebiete Λ durch kubische Gebiete ausschöpfen, bis

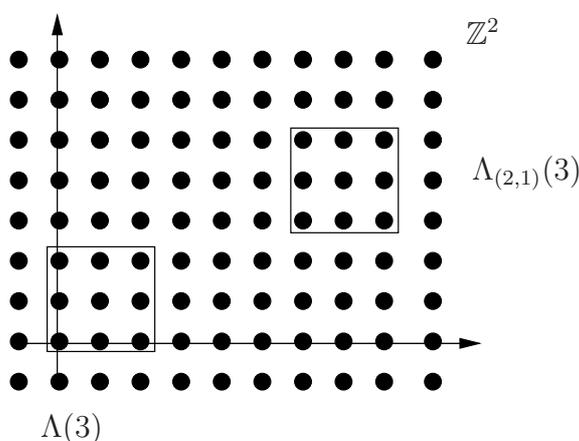


Abbildung 6.1: Würfel $\Lambda(a)$ der Kantenlänge a und verschobener Würfel $\Lambda_n(a)$ in \mathbb{Z}^d

auf Randterme von kleinem Volumen. Natürlich benötigen wir dazu auch die (in Abb. 6.1 dargestellten) verschobenen Würfel der Form

$$\Lambda_n(a) := \{b \in \mathbb{Z}^d \mid b - a \cdot n \in \Lambda(a)\} \quad (n \in \mathbb{Z}^d).$$

6.9 Lemma Sei J ein translationsinvariantes Potential der Reichweite R auf \mathbb{Z}^d und $a_1, a_2 \in \mathbb{N}$. Dann gilt

$$|F_{\Lambda(a_1)}(\beta) - F_{\Lambda(a_2)}(\beta)| \leq 2dR\|J\| \cdot \left(\frac{1}{a_1} + \frac{1}{a_2} \right) \quad (\beta \in \mathbb{R}^+).$$

6.10 Bemerkung Die Freien Energien $F_{\Lambda(a)}$ bilden also eine Cauchyfolge bezüglich der Kantenlängen a der Würfel. Damit existiert der Limes (6.1) uniform in β : Es gilt

$$|F(\beta) - F_{\Lambda(a)}(\beta)| \leq \frac{2dR\|J\|}{a}. \quad (6.2)$$

Bew.: Wir zeigen die Ungleichung

$$|\Delta| \leq \frac{2dR\|J\|}{a_1}$$

mit

$$\Delta := F_{\Lambda(a_1)}(\beta) - F_{\Lambda(a_1 \cdot a_2)}(\beta),$$

woraus sich das Lemma ergibt.

Der Trick besteht darin, den großen Würfel der Kantenlänge $a_1 \cdot a_2$ durch die a_2^d Würfel $\Lambda_n(a_1)$ der Kantenlängen a_1 mit $n \in \Lambda(a_2)$ auszuschöpfen. Es gilt

$$\Delta = \frac{1}{\beta|\Lambda(a_1 a_2)|} \ln \left(\sum_{\sigma \in E^{\Lambda(a_1 a_2)}} e^{-\beta H_{\Lambda(a_1 a_2)}(\sigma)} \right) - \frac{1}{\beta|\Lambda(a_1)|} \ln \left(\sum_{\tau \in E^{\Lambda(a_1)}} e^{-\beta H_{\Lambda(a_1)}(\tau)} \right).$$

Wir zerlegen jetzt $H_{\Lambda(a_1 a_2)}$ in

$$H_{\Lambda(a_1 a_2)}^I := \sum_{n \in \Lambda(a_2)} H_{\Lambda_n(a_1)} \quad \text{und} \quad H_{\Lambda(a_1 a_2)}^{II} := H_{\Lambda(a_1 a_2)} - H_{\Lambda(a_1 a_2)}^I.$$

$H_{\Lambda(a_1 a_2)}^I$ beschreibt ausschließlich die Wechselwirkung innerhalb der Würfelchen der Kantenlänge a_1 . Daher ist der Restterm von der Form

$$H_{\Lambda(a_1 a_2)}^{II}(\sigma) = - \sum_{\Lambda' \in M} J(\Lambda') \sigma_{\Lambda'}$$

mit

$$M := \left\{ \Lambda' \subseteq \Lambda(a_1 a_2) \mid J(\Lambda') \neq 0 \text{ und } \exists m \neq n \in \Lambda(a_2) : \Lambda' \cap \Lambda_m(a_1) \neq \emptyset \neq \Lambda' \cap \Lambda_n(a_1) \right\},$$

koppelt also verschiedene Würfelchen der Kantenlänge a_1 .

Wegen der endlichen Reichweite R des Potentials befinden sich alle $\Lambda' \in M$ in der Nähe der Kanten der kleinen Würfelchen:

$$\Lambda' \subseteq U(R) \subseteq \Lambda(a_1 a_2)$$

mit

$$U(R) := \bigcup_{i=1}^d \bigcup_{n=1}^{a_2-1} \left\{ b \in \Lambda(a_1 a_2) \mid |b_i - n a_1 + \frac{1}{2}| < R \right\}.$$

Das Volumen von $U(R)$ ist aber im Verhältnis zum Volumen des großen Würfels

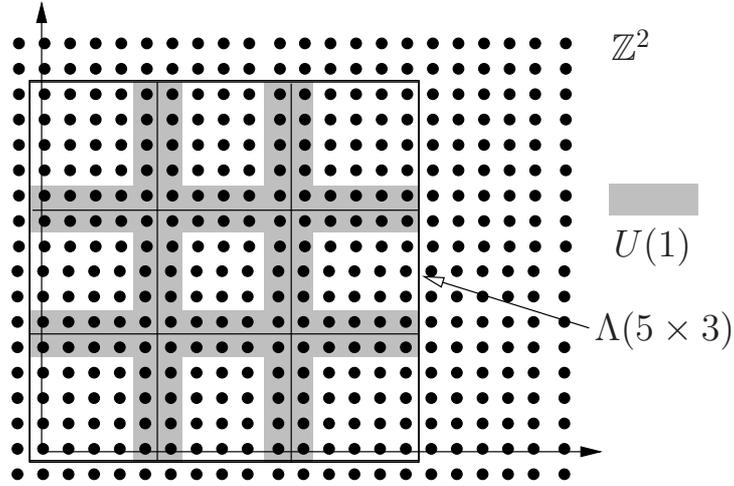


Abbildung 6.2: Dimension $d = 2$, verschobene Kästchen $\Lambda_n(a_1)$ der Kantenlänge $a_1 = 5$, Verschiebungen mit $n \in \Lambda(a_2)$ mit $a_2 = 3$, Reichweite $R = 1$

$\Lambda(a_1 a_2)$ klein, wenn a_1 groß ist:

$$|U(R)| \leq d (a_2 - 1) 2R (a_1 a_2)^{d-1} < \frac{2dR}{a_1} |\Lambda(a_1 a_2)|$$

(siehe Abb. 6.2). Nach Lemma 6.8 gilt daher

$$\|H_{\Lambda(a_1 a_2)}^{II}\|_{\max} \leq \frac{2dR}{a_1} |\Lambda(a_1 a_2)| \|J\|.$$

Wir können nun die Differenz Δ der Freien Energien betragsmäßig durch

$$|\Delta| \leq \frac{\|H_{\Lambda(a_1 a_2)}^{II}\|_{\max}}{|\Lambda(a_1 a_2)|} \leq \frac{2dR}{a_1} \|J\| \quad (6.3)$$

abschätzen. Es ist nämlich

$$\Delta = \frac{1}{\beta |\Lambda(a_1 a_2)|} \ln \left[\frac{\sum_{\sigma \in E^{\Lambda(a_1 a_2)}} \exp(-\beta H_{\Lambda(a_1 a_2)}(\sigma))}{\sum_{\sigma \in E^{\Lambda(a_1 a_2)}} \exp(-\beta H_{\Lambda(a_1 a_2)}^I(\sigma))} \right],$$

da

$$\sum_{\sigma \in E^{\Lambda(a_1 a_2)}} \exp(-\beta H_{\Lambda(a_1 a_2)}^I(\sigma)) = \left(\sum_{\tau \in E^{\Lambda(a_1)}} \exp(-\beta H_{\Lambda(a_1)}(\tau)) \right)^{|\Lambda(a_2)|}.$$

Deshalb gilt

$$\begin{aligned}\Delta &\leq \frac{1}{\beta|\Lambda(a_1a_2)|} \ln \left[\max_{\sigma \in E^{\Lambda(a_1a_2)}} \frac{\exp(-\beta H_{\Lambda(a_1a_2)}(\sigma))}{\exp(-\beta H_{\Lambda(a_1a_2)}^I(\sigma))} \right] \\ &\leq \frac{1}{\beta|\Lambda(a_1a_2)|} \ln \left[\exp\left(\beta \|H_{\Lambda(a_1a_2)}^{II}\|_{\max}\right) \right] = \frac{\|H_{\Lambda(a_1a_2)}^{II}\|_{\max}}{|\Lambda(a_1a_2)|}.\end{aligned}$$

Mit einer entsprechenden Ungleichung für $-\Delta$ ergibt sich (6.3). \square

6.4 Limes für beliebige Gebiete

Interessieren wir uns nur für würfelförmige Gebiete, so sind wir jetzt fertig, denn wir können die Dichte der Freien Energie im thermodynamischen Limes der gegen Unendlich gehenden Kantenlänge a durch

$$F(\beta) := \lim_{a \rightarrow \infty} F_{\Lambda(a)}(\beta) \quad (\beta > 0)$$

definieren. Allgemeiner gilt aber der folgende Satz:

6.11 Satz Für ein translationsinvariantes Potential $J : \mathcal{S}(d) \rightarrow \mathbb{R}$ existiert der van-Hove-Limes der freien Energiedichte

$$F = \lim_{\Lambda \rightarrow \infty} F_{\Lambda}.$$

$\beta \mapsto \beta F(\beta)$ ist konkav in der inversen Temperatur $\beta \in \mathbb{R}^+$.

Bew.: • Wir betrachten zunächst Potentiale der endlichen Reichweite R . Wenn der van-Hove-Limes der freien Energiedichte existiert, so muss er natürlich gleich dem Limes für würfelförmige Gebiete der Kantenlänge $a \rightarrow \infty$ sein. Daher vergleichen wir F_{Λ} mit $F_{\Lambda(a)}$.

• Dazu zerlegen wir Λ in Würfel der Kantenlänge a und einen Rand:

$$\Lambda = \Lambda^I \dot{\cup} \Lambda^{II}$$

mit

$$\Lambda^I := \bigcup_{n \in \Sigma} \Lambda_n(a) \quad , \quad \Sigma := \{n \in \mathbb{Z}^d \mid \Lambda_n(a) \subseteq \Lambda\},$$

siehe Abb. 6.3. Es ist wegen $\text{diam}(\Lambda(a)) = (a-1)d$

$$\Lambda^{II} \subseteq \{\ell \in \Lambda \mid d(\ell, \Lambda^c) \leq h\} \quad \text{mit} \quad h := (a-1)d,$$

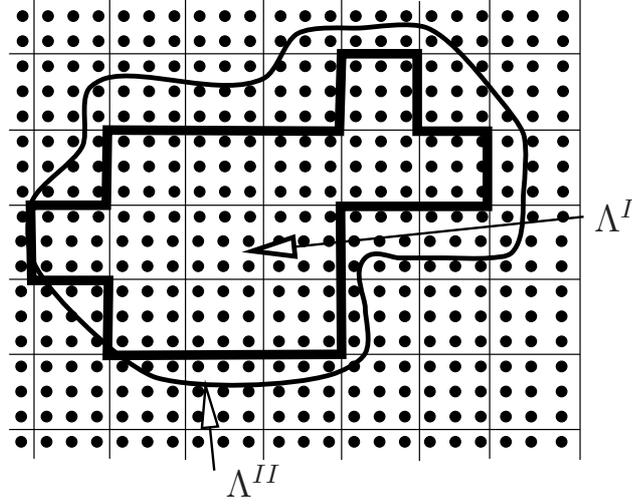


Abbildung 6.3: Zerlegung von $\Lambda \subseteq \mathbb{Z}^2$ in Vereinigung Λ^I von Würfeln der Kantenlänge $a = 3$ und Randgebiet Λ^{II}

also $|\Lambda^{II}| \leq V_h(\Lambda)$. Im van-Hove-Limes gilt daher

$$\lim_{\Lambda \rightarrow \infty} \frac{|\Lambda^{II}|}{|\Lambda|} = 0,$$

das Volumen des Randgebietes geht also im Vergleich zum Gesamtvolumen gegen Null.

• Entsprechend zerlegen wir die Energiefunktion $H_\Lambda : E^\Lambda \rightarrow \mathbb{R}$ in

$$H_\Lambda = H^I + H^{II} \quad \text{mit} \quad H^I(\sigma) := - \sum_{n \in \Sigma} \sum_{\Lambda' \subseteq \Lambda_n(a)} J(\Lambda') \sigma_{\Lambda'}.$$

Der Restterm H^{II} beschreibt Wechselwirkungen zwischen Spins in verschiedenen Würfeln und solche, die Spins im Randgebiet Λ^{II} einbeziehen. Alle Wechselwirkungsterme $J(\Lambda') \sigma_{\Lambda'}$ von H^{II} entsprechen also Gebieten $\Lambda' \subseteq U_a(R)$, mit

$$U_a(R) := \Lambda^{II} \cup \bigcup_{i=1}^d \bigcup_{n \in \mathbb{Z}} \left\{ \ell \in \Lambda \mid \left| \ell_i - na + \frac{1}{2} \right| < R \right\}.$$

Wegen unserer Volumenabschätzung (Lemma 6.8) für die Energie ist der Beitrag von H^{II} zur Freien Energie und damit $|F_\Lambda - F_{\Lambda(a)}|$ dann klein, wenn

$$\frac{|U_a(R)|}{|\Lambda|} \leq \frac{|\Lambda^{II}|}{|\Lambda|} + \frac{a^d - (a - 2R)^d}{a^d} \quad (6.4)$$

klein ist, denn der zweite Term auf der rechten Seite von (6.4) ist der Anteil der Punkte in $\Lambda(a)$, die einen Abstand von $\Lambda(a)^c$ besitzen, der kleiner als R ist.

Wir wissen schon, dass bei fester Kantenlänge a der erste Term den Limes $\lim_{\Lambda \rightarrow \infty} \frac{|\Lambda^{II}|}{|\Lambda|} = 0$ besitzt. Also können wir a im thermodynamischen Limes gegen unendlich gehen lassen, wodurch der von den flächennahen Gebieten der Würfel herrührende zweite Beitrag $1 - (1 - R/a)^d$ zu $|U_a(R)|/|\Lambda|$ gegen Null geht.

• Wir schätzen nun die Differenz zur in (6.1) definierten Dichte F der Freien Energie ab:

$$|F_\Lambda(\beta) - F(\beta)| \leq |\Delta_1| + |\Delta_2| + |\Delta_3| \quad (6.5)$$

mit

$$\Delta_1 := F_\Lambda(\beta) - F_\Lambda^I(\beta) \quad , \quad \Delta_2 := F_\Lambda^I(\beta) - F_{\Lambda(a)}(\beta)$$

und

$$\Delta_3 := F_{\Lambda(a)}(\beta) - F(\beta).$$

Hierbei ist F_Λ^I die H^I zugeordnete Freie Energie, d. h.

$$F_\Lambda^I(\beta) := -\frac{1}{\beta|\Lambda|} \ln \left(\sum_{\sigma \in E^\Lambda} \exp(-\beta H^I(\sigma)) \right).$$

Es gilt analog zum Beweis von Lemma 6.9 und unter Verwendung von Lemma 6.8

$$|\Delta_1| \leq \frac{1}{\beta|\Lambda|} \ln[\exp(\beta \|H^{II}\|_{\max})] = \frac{\|H^{II}\|_{\max}}{|\Lambda|} \leq \frac{|U_a(R)|}{|\Lambda|} \cdot \|J\|.$$

Weiter ist wegen $|\Sigma| = |\Lambda^I|/|\Lambda(a)|$

$$\begin{aligned} \Delta_2 &= \frac{1}{\beta|\Lambda(a)|} \ln \left(\sum_{\sigma \in E^{\Lambda(a)}} \exp(-\beta H_{\Lambda(a)}(\sigma)) \right) - \\ &\quad \frac{1}{\beta|\Lambda|} \ln \left(2^{|\Lambda^{II}|} \left(\sum_{\sigma \in E^{\Lambda(a)}} \exp(-\beta H_{\Lambda(a)}(\sigma)) \right)^{|\Sigma|} \right) \\ &= \frac{|\Lambda^{II}| \ln 2}{\beta|\Lambda|} + \left(1 - \frac{|\Lambda^I|}{|\Lambda|} \right) F_{\Lambda(a)}(\beta) \\ &= \frac{|\Lambda^{II}|}{|\Lambda|} \left(F_{\Lambda(a)}(\beta) + \frac{\ln 2}{\beta} \right). \end{aligned}$$

Schließlich ist unter Verwendung von (6.2)

$$|\Delta_3| \leq \frac{2dR\|J\|}{a}.$$

Lassen wir nun für die van-Hove-Folge $(\Lambda_k)_{k \in \mathbb{N}}$ die Kantenlängen a_k so gegen unendlich gehen, dass im Limes $k \rightarrow \infty$ das Volumenverhältnis (6.4) gegen Null strebt. Dann gilt $\lim_{k \rightarrow \infty} |\Delta_l| = 0$ für $l = 1, 2, 3$ und mit (6.5)

$$\lim_{k \rightarrow \infty} F_{\Lambda_k}(\beta) = F(\beta).$$

• Potentiale unendlicher Reichweite lassen sich im Normsinn durch solche endlicher Reichweite approximieren. Schneiden wir das Potential J ab, d. h. setzen wir

$$J^R : \mathcal{S} \rightarrow \mathbb{R} \quad , \quad J^R(\Lambda) := \begin{cases} J(\Lambda) & , \text{diam}(\Lambda) \leq R \\ 0 & , \text{diam}(\Lambda) > R \end{cases} \quad ,$$

dann konvergiert für $R \rightarrow \infty$ die Differenz $\|J - J^R\|$ gegen Null. Entsprechend konvergiert die Freie Energie F^R des Potentials J^R wegen der für alle $\Lambda \in \mathcal{S}$ geltenden Abschätzung

$$|F_\Lambda(\beta) - F_\Lambda^R(\beta)| \leq \|J - J^R\| \quad (\beta > 0)$$

gegen die Freie Energie F , siehe Satz 7.1.

• Die Konkavität (und damit insbesondere Stetigkeit) von $\beta \mapsto \beta F(\beta)$ folgt aus der Konkavität der approximierenden Funktionen. \square

Dies war nun ein etwas aufwendiger Beweis. Wir können aber absehen, dass die verwendeten Methoden sich auch auf veränderte Fragestellungen anwenden lassen.

6.12 Bemerkungen 1. Beispielsweise gilt für translationsinvariante Potentiale endlicher Reichweite (oder mit genügend schnellem Abfallverhalten) die Existenz des van-Hove-Limes der freien Energiedichten

$$F_\Lambda^\tau(\beta) := -\frac{1}{\beta|\Lambda|} \ln \left(\sum_{\sigma \in E^\Lambda} e^{-\beta H_\Lambda^\tau(\sigma)} \right) \quad (\beta \geq 0)$$

mit *Randbedingungen* τ , und der Limes ist unabhängig von den Randbedingungen und gleich dem Limes $\lim_{\Lambda \rightarrow \infty} F_\Lambda$ ohne Randbedingungen.

In einer Übungsaufgabe wird dies für den Fall des Isingmodells nachgeprüft.

2. In ähnlicher Weise lassen sich auch quantenmechanische Spinsysteme behandeln. Die Beweisstruktur ist dabei ganz analog. Da die Zustandssumme $Z_\Lambda(\beta) = \text{tr}(e^{-\beta H_\Lambda})$ ist und $F_\Lambda(\beta) = -\frac{1}{\beta|\Lambda|} \ln Z_\Lambda(\beta)$, können wir den Operator H_Λ geeignet in $H_\Lambda = H^I + H^{II}$ aufspalten und das folgende Lemma verwenden.

6.13 Lemma Seien $A^I, A^{II} \in B(\mathcal{H})$ selbstadjungiert auf \mathcal{H} , $\dim \mathcal{H} < \infty$. Dann gilt $|\ln(\operatorname{tr}(e^{A^I+A^{II}})) - \ln(\operatorname{tr}(e^{A^I}))| \leq \|A^{II}\|$.

Bew.: Sei $g(\lambda) := \ln(\operatorname{tr}(e^{A^I+\lambda A^{II}}))$, $\lambda \in [0, 1]$. Dann ist

$$g(1) - g(0) = \int_0^1 d\lambda \frac{d}{d\lambda} g(\lambda) = \int_0^1 \frac{\operatorname{tr}(A^{II} e^{A^I+\lambda A^{II}})}{\operatorname{tr}(e^{A^I+\lambda A^{II}})} d\lambda,$$

sodass wegen $|\operatorname{tr}(B \cdot C)| \leq \|B\| \cdot \operatorname{tr}(C)$ für $C > 0$

$$|g(1) - g(0)| \leq \int_0^1 \|A^{II}\| d\lambda = \|A^{II}\|.$$

□

3. Betrachten wir statt Spinsystemen wechselwirkende Teilchen, z. B. Gase, so kompliziert sich das Problem. Es muss u. a. sichergestellt sein, dass die Teilchen sich nicht im "thermodynamischen Limes" zu Konglomeraten immer höherer Dichte zusammenballen.

Diese Fragestellungen werden in der Vorlesung nicht behandelt, man kann aber eine Diskussion im Buch [Ru] von RUELLE finden.

6.5 Die Ising-Spinkette

Existenzaussagen wie die des letzten Kapitels sind natürlich die Voraussetzung weiterer Untersuchungen, aber vom physikalischen Standpunkt gerade wegen ihrer Allgemeinheit nur mäßig interessant.

Wir wollen nun als einfaches Beispiel die Ising-Spinkette untersuchen, bei der $\Omega = E^{\mathbb{Z}}$ ist und gemäß Beispiel 5.10 das Potential durch

$$J(\Lambda) := \begin{cases} j & , \Lambda = \{k, k+1\} & , k \in \mathbb{Z} \\ h & , \Lambda = \{k\} & , k \in \mathbb{Z} \\ 0 & \text{sonst} \end{cases}$$

gegeben ist. Um den thermodynamischen Limes der Freien Energie zu errechnen, brauchen wir nur Gebiete der Form

$$\Lambda(a) = \{0, \dots, a-1\} \quad (a \in \mathbb{N})$$

zu betrachten, da diese eine van-Hove-Folge bilden. Es gilt

$$Z_{\Lambda(a)}(\beta) = \sum_{\sigma \in E^{\Lambda(a)}} e^{-\beta H_{\Lambda(a)}(\sigma)}$$

mit

$$H_{\Lambda(a)}(\sigma) = -j \sum_{i=1}^{a-1} \sigma_{i-1} \cdot \sigma_i - h \sum_{i=0}^{a-1} \sigma_i.$$

Mit den Konstanten $j' := \beta j$ und $h' := \beta h$ ist also

$$Z_{\Lambda(a)}(\beta) = \sum_{\sigma_0, \dots, \sigma_{a-1} \in E} \left(\prod_{i=1}^{a-1} e^{j' \sigma_{i-1} \sigma_i + h' \sigma_i} \right) e^{h' \sigma_0}.$$

Die Auswertung der Zustandssumme erfolgt nun durch Berechnung von Potenzen der so genannten *Transfermatrix* $A \in \mathcal{M}(2, \mathbb{R})$ mit

$$A := \begin{pmatrix} e^{j'+h'} & e^{-j'+h'} \\ e^{-j'-h'} & e^{j'-h'} \end{pmatrix}.$$

Setzen wir nämlich $v \in \mathbb{R}^2$ gleich $v := \begin{pmatrix} e^{h'} \\ e^{-h'} \end{pmatrix}$, so ist

$$Z_{\Lambda(a)}(\beta) = \left\langle \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix}, A^{a-1} v \right\rangle,$$

wobei $\langle \cdot, \cdot \rangle$ das innere Produkt im \mathbb{R}^2 ist. Die Paare (σ_{i-1}, σ_i) spielen hier also die Rolle von Indexpaaren der 2×2 -Matrix A .

6.14 Satz Die Dichte $F(\beta) = \lim_{a \rightarrow \infty} F_{\Lambda(a)}(\beta)$ der Freien Energie hat die Form

$$F(\beta) = -j - \frac{1}{\beta} \ln \left(\cosh(\beta h) + \sqrt{\cosh^2(\beta h) - (1 - e^{-4j\beta})} \right).$$

Bew.: Die Eigenwerte der Matrix A sind reell:

$$\lambda_{I/II} = e^{j'} \left(\cosh(h') \pm \sqrt{\cosh^2(h') - (1 - e^{-4j'})} \right).$$

Es ist damit $|\lambda_{II}| < \lambda_I$. $W \in \mathcal{M}(2, \mathbb{R})$ diagonalisiere A :

$$WAW^{-1} = \begin{pmatrix} \lambda_I & 0 \\ 0 & \lambda_{II} \end{pmatrix}.$$

Dann gilt

$$A^k = W^{-1} \begin{pmatrix} \lambda_I^k & 0 \\ 0 & \lambda_{II}^k \end{pmatrix} W = \lambda_I^k W^{-1} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & (\lambda_{II}/\lambda_I)^k \end{pmatrix} W.$$

Wir können daher die Zustandssumme von oben durch

$$\begin{aligned} Z_{\Lambda(a)}(\beta) &= \left\langle \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix}, A^{a-1} v \right\rangle \leq \left\| \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix} \right\| \|v\| \|A^{a-1}\| \\ &\leq 2e^{h'} \|W\| \|W^{-1}\| \lambda_I^{a-1} = c_o \lambda_I^{a-1} \end{aligned}$$

abschätzen, wobei die Konstante c_o von a nicht abhängt. Da A strikt positive Einträge besitzt, gilt dies auch für alle Potenzen A^k , $k \geq 1$. Daher gilt

$$Z_{\Lambda(a)}(\beta) \geq \left\langle \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix}, A^{a-1} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix} \right\rangle e^{-|h'|} \geq \lambda_I^{a-1} e^{-|h'|} = c_u \lambda_I^{a-1}.$$

Hier wurde Lemma 6.15 verwandt: Es folgt damit wegen

$$F_{\Lambda(a)}(\beta) = -\frac{1}{\beta a} \ln(Z_{\Lambda(a)}(\beta))$$

$$\lim_{a \rightarrow \infty} F_{\Lambda(a)}(\beta) = -\frac{1}{\beta} \ln(\lambda_I(\beta)). \quad \square$$

6.15 Lemma $X \equiv \begin{pmatrix} x_{11} & x_{12} \\ x_{21} & x_{22} \end{pmatrix} \in \mathcal{M}(2, \mathbb{R})$ mit $x_{ik} \geq 0$ erfülle die Eigenwertgleichung $X \begin{pmatrix} c \\ s \end{pmatrix} = \lambda \begin{pmatrix} c \\ s \end{pmatrix}$ für $\lambda \geq 0$, $c, s > 0$. Dann ist $\max(x_{11} + x_{12}, x_{21} + x_{22}) \geq \lambda$.

Bew.: Es folgt $x_{11} + \frac{s}{c}x_{12} = \lambda = \frac{c}{s}x_{21} + x_{22}$. Für $\frac{s}{c} \leq 1$ ist $x_{11} + x_{12} \geq \lambda$, sonst $x_{21} + x_{22} \geq \lambda$. \square

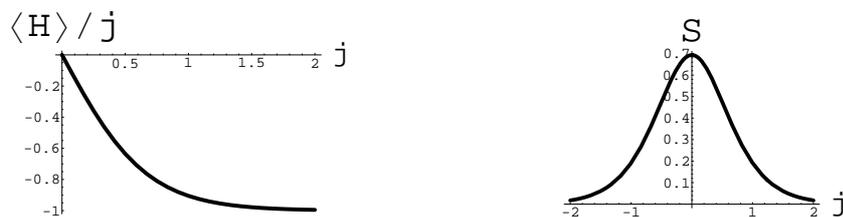


Abbildung 6.4: Ising-Spinkette: Erwartungswert der Energiedichte (links); Entropiedichte (rechts), jeweils als Funktion des Wechselwirkungskoeffizienten j

Unter Verwendung von Satz 6.3 können wir relevante thermodynamische Größen berechnen:

6.16 Korollar Für den thermodynamischen Limes der Ising-Spinkette gilt für die Energiedichte $\langle H \rangle(\beta) := \frac{d}{d\beta}(\beta F(\beta))$ und die Entropiedichte $S(\beta) := \beta(\langle H \rangle(\beta) - F(\beta))$ (siehe Abb. 6.4)

1. Im Fall verschwindenden äußeren Magnetfeldes $h = 0$:

$$\langle H \rangle(\beta) = -j \tanh(\beta j) \quad , \quad S(\beta) = \ln(2 \cosh(\beta j)) - \beta j \tanh(\beta j)$$

2. Für verschwindende Wechselwirkung $j = 0$:

$$\langle H \rangle(\beta) = -h \tanh(\beta h) \quad , \quad S(\beta) = \ln(2 \cosh(\beta h)) - \beta h \tanh(\beta h).$$

Bew.: Durch Einsetzen von F aus Satz 6.14 in die Definitionen. □

6.17 Bemerkung Wir lesen ab, dass der (durch j geteilte) Erwartungswert der Energiedichte bei schwacher Kopplung nahe dem Mittelwert ist, sich bei starker Kopplung aber -1 nähert, weil dann benachbarte Spins meist gleich ausgerichtet sind.

Die Entropiedichte geht bei betragsmäßig starker Kopplung gegen Null, weil bei Kenntnis des i -ten Spins die Ausrichtung des $(i + 1)$ -ten Spins mit hoher Wahrscheinlichkeit richtig vorausgesagt werden kann (gleich für $j \gg 0$, ungleich für $j \ll 0$).

Natürlich lässt sich auch der Energieerwartungswert und die Entropie im allgemeinen Fall ausrechnen, die Formeln werden aber länglicher.

Da für $\beta > 0$ und $(j, h) \in \mathbb{R}^2$ die Freie Energie reell-analytisch von diesen drei Parametern abhängt, erwarten wir für positive Temperaturen keinen "Phasenübergang" der Ising-Spinkette.

Im folgenden Kapitel werden wir eine Definition des Begriffs "Phasenübergang" kennenlernen.

7 Phasenübergänge und asymptotische Gibbsmaße

7.1 Parameterabhängigkeit der Freien Energie	75
7.2 Freie Energie von Spinketten	78
7.3 Definition asymptotischer Gibbsmaße	82
7.4 Existenz und Struktur asymptotischer Gibbsmaße	86

Es ist gar nicht so leicht, den Begriff der Phase vernünftig zu definieren.

Nehmen wir das Beispiel von H_2O . Wieviele Phasen besitzt H_2O ? Die übliche Antwort wird sein: Drei, nämlich die feste (Eis), flüssige (Wasser) und gasförmige (Dampf). Diese Phasen werden durch Veränderung der Temperatur und des Drucks ineinander übergeführt.

Das Zustands- oder Phasendiagramm sieht in etwa wie in Abb. 7.1 aus: Die Kurven im Zustandsdiagramm, die die verschiedenen Aggregatzustände oder Phasen voneinander trennen, heißen in der physikalischen Literatur *Phasenkoexistenzlinien*, Punkte, an die drei Phasen angrenzen, *Tripelpunkte*.

Nun ist die obige Antwort (drei Phasen für H_2O) sicher falsch, denn erhöht man den Druck, so findet man noch mindestens weitere zwölf "Phasen", so genannte Hochdruckmodifikationen.

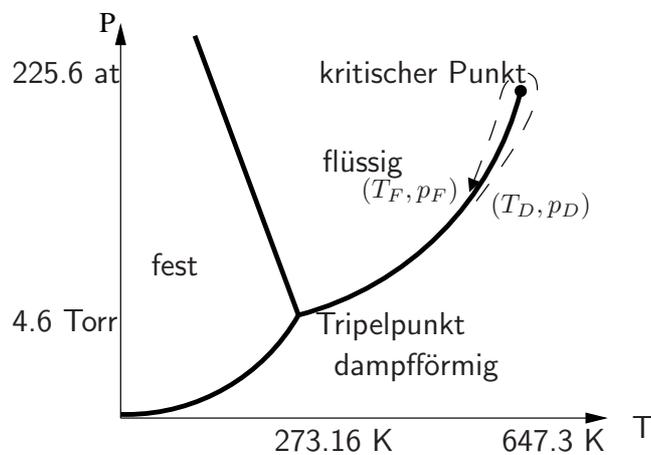


Abbildung 7.1: Phasendiagramm von H_2O (nicht maßstabsgetreu; 1 at = 735 Torr)

Darum soll es hier aber nicht gehen, sondern um die Frage der Unterscheidbarkeit der "Phasen". Schauen wir uns das (p, T) -Zustandsdiagramm genauer an, so stellen wir fest, dass die Phasenkoexistenzlinie von Wasser und Dampf im Nichts endet. Den Endpunkt nennt man *kritischen Punkt*.

An diesem Punkt muss allerdings auch unsere Kritik des naiven Phasenbegriffs ansetzen. Denn offensichtlich ist es möglich, jeden Punkt (p_D, T_D) in der "Dampfphase" mit jedem Punkt (p_F, T_F) in der "flüssigen Phase" durch eine Kurve zu verbinden, die keine Phasenkoexistenzlinie schneidet. Mit anderen Worten gibt es keinen qualitativen Unterschied zwischen Wasser und Dampf, der es uns ermöglichen würde, diese beiden "Phasen" formal zu definieren. Die Dichte beispielsweise kann für eine solche Definition nicht herhalten, da sie sich glatt mit (p, T) ändert, wenn man keine Phasenkoexistenzlinie überschreitet (beim kritischen Punkt ist sie etwa $\frac{1}{3}g/cm^3$).

Übrig bleibt nach dieser Diskussion die etwas irritierende Feststellung, dass *Phasenübergänge* besser definiert sind als *Phasen* (wir werden allerdings später eine mathematische Definition von Phasen kennen lernen, die jeweils für feste Werte der äußeren Parameter $(p, T, \text{etc.})$ anwendbar ist). Denn die Freie Energie ist genau an den Phasenkoexistenzlinien nicht glatt (C^∞) in den Parametern Druck und Temperatur.

7.1 Parameterabhängigkeit der Freien Energie

Allgemein können wir also einen Phasenübergangspunkt als einen Wert der äußeren Parameter definieren, an dem die Freie Energie nicht glatt bzw. sogar reell-

analytisch von den Parametern abhängt.

Wir wollen diese Definition für den Fall der Spinsysteme präzisieren. Mit

$$H_\Lambda^J(\sigma) := - \sum_{\Lambda' \subseteq \Lambda} J(\Lambda') \sigma_{\Lambda'} \quad , \quad Z_\Lambda(J) := \sum_{\sigma \in E^\Lambda} e^{-H_\Lambda^J(\sigma)}$$

betrachten wir $F_\Lambda(J) := -\frac{1}{|\Lambda|} \ln(Z_\Lambda(J))$.

7.1 Satz Die Freie Energie ist ein lipschitzstetiges konkaves Funktional

$$F : \mathcal{J}(d) \rightarrow \mathbb{R} \quad , \quad F(J) = \lim_{\Lambda \rightarrow \infty} F_\Lambda(J)$$

auf dem Banachraum $(\mathcal{J}(d), \|\cdot\|)$ der translationsinvarianten Potentiale (siehe (5.8)): Es gilt

$$|F(J^I) - F(J^{II})| \leq \|J^I - J^{II}\|.$$

Bew.:

- Da wir die inverse Temperatur β in das Wechselwirkungspotential absorbiert haben, ergibt sich für die Dichte der Freien Energie

$$\begin{aligned} F_\Lambda(J) &:= -\frac{1}{|\Lambda|} \ln \left(\sum_{\sigma \in E^\Lambda} \exp \left(\sum_{\Lambda' \subseteq \Lambda} J(\Lambda') \sigma_{\Lambda'} \right) \right) \\ F_\Lambda(J^I) - F_\Lambda(J^{II}) &= \frac{1}{|\Lambda|} \ln \left(\frac{\sum_{\sigma \in E^\Lambda} \exp \left(\sum_{i \in \Lambda} \sum_{\substack{\Lambda' \subseteq \Lambda \\ \Lambda' \ni i}} \frac{J^{II}(\Lambda')}{|\Lambda'|} \sigma_{\Lambda'} \right)}{\sum_{\sigma \in E^\Lambda} \exp \left(\sum_{i \in \Lambda} \sum_{\substack{\Lambda' \subseteq \Lambda \\ \Lambda' \ni i}} \frac{J^I(\Lambda')}{|\Lambda'|} \sigma_{\Lambda'} \right)} \right) \\ &\leq \frac{1}{|\Lambda|} \ln \left(\max_{\sigma \in E^\Lambda} \exp \left(\sum_{i \in \Lambda} \sum_{\substack{\Lambda' \subseteq \Lambda \\ \Lambda' \ni i}} \frac{J^{II}(\Lambda') - J^I(\Lambda')}{|\Lambda'|} \sigma_{\Lambda'} \right) \right) \\ &\leq \frac{1}{|\Lambda|} \ln \left(\exp \left(\sum_{i \in \Lambda} \|J^{II} - J^I\| \right) \right) = \|J^{II} - J^I\|. \end{aligned}$$

Aus dieser in $\Lambda \in \mathcal{S}(d)$ uniformen Abschätzung folgt Lipschitzstetigkeit mit Konstante 1.

- Analog zu Satz 6.3.3 ergibt sich für die Konvexkombination

$$J^{(c)} := (1 - c)J^{(0)} + cJ^{(1)}$$

der Potentiale $J^{(0)}, J^{(1)} \in \mathcal{J}(d)$ für die Freie Energie $F_\Lambda^{(c)}$ der Energiefunktion $H_\Lambda^{(c)} : E^\Lambda \rightarrow \mathbb{R}$, $H_\Lambda^{(c)}(\sigma) := -\sum_{\Lambda' \subseteq \Lambda} J_{\Lambda'}^{(c)} \sigma_{\Lambda'}$

$$\frac{d^2}{dc^2} F_\Lambda^{(c)} = \left\langle \frac{d}{dc} H_\Lambda^{(c)} \right\rangle^2 - \left\langle \left(\frac{d}{dc} H_\Lambda^{(c)} \right)^2 \right\rangle \leq 0.$$

Da dies die negative Varianz der nach dem Parameter abgeleiteten Energiefunktion ist, ist $c \mapsto F_\Lambda^{(c)}$ also konkav, und diese Eigenschaft bleibt im thermodynamischen Limes erhalten. \square

Diese Sichtweise umfasst unsere bisherige, bei der wir F als Funktion der inversen Temperatur β aufgefasst haben, denn wir können ja den multiplikativen Parameter β einfach in J absorbieren (der verbleibende Unterschied unserer neuen Sichtweise zur alten ist, dass wir nicht mehr den Logarithmus der Zustandssumme durch $|\Lambda| \cdot \beta$, sondern nur noch durch $|\Lambda|$ dividieren).

In Wirklichkeit können wir in einem Experiment J nicht beliebig verändern, sondern wir können nur endlich viele Parameter wie Temperatur oder äußeres Magnetfeld verändern. Wir haben also eine Abbildung

$$\mu : U \rightarrow \mathcal{J}$$

vom Raum $U \subseteq \mathbb{R}^n$ der Parameter in den Raum \mathcal{J} der Potentiale.

7.2 Beispiel d -dimensionales Isingmodell mit Parameterraum $U := \mathbb{R}^+ \times \mathbb{R}$,

$$\mu(\beta, h) := J_{(\beta, h)} \quad \text{mit} \quad J_{(\beta, h)}(\Lambda) := \begin{cases} \beta & , \Lambda = \{k, \ell\}, \|k - \ell\|_1 = 1 \\ \beta \cdot h & , |\Lambda| = 1 \\ 0 & , \text{sonst} \end{cases}.$$

7.3 Definition • Sei $\mu : U \rightarrow \mathcal{J}$ reell-analytisch. Dann heißen die Punkte $p \in U$, bei denen die Abbildung $F \circ \mu : U \rightarrow \mathbb{R}$ nicht reell analytisch ist, **Phasenübergangspunkte**.

• Ist für $k \in \mathbb{N}$ bei $p \in U$ die Abbildung $F \circ \mu$ $(k-1)$ -mal stetig differenzierbar, aber nicht k -mal stetig differenzierbar, dann heißt p **Phasenübergangspunkt k -ter Ordnung**.

7.4 Bemerkung Natürlich müssen wir verlangen, dass die Parametrisierung $\mu : U \rightarrow \mathcal{J}$ der Potentiale reell-analytisch ist, denn wir sind ja an den Differenzierbarkeitseigenschaften der Freien Energie und nicht der Parametrisierung interessiert.

Während für Systeme mit physikalisch vernünftigen Eigenschaften im Allgemeinen der thermodynamische Limes im Sinne gleichmäßiger Konvergenz der Freien Energien auf Kompakta im reellen Parameterraum existiert, gilt eine ähnliche

Aussage im komplexen Parameterraum im Allgemeinen nicht mehr. Es kann daher durchaus der Fall sein, dass die $F_\Lambda(p)$ für reelle Parameter p im van-Hove-Limes $\Lambda \rightarrow \infty$ einem Grenzwert f zustreben, aber in jeder komplexen Umgebung des Parameters p für genügend große $|\Lambda|$ Punkte p_Λ existieren mit $Z_\Lambda(p_\Lambda) = 0$, (also formal $F_\Lambda(p_\Lambda) = -\infty$).

Dieses Verhalten führt dazu, dass F nicht reell-analytisch bei p ist, also dort einen Phasenübergang aufweist.

7.2 Freie Energie von Spinketten

7.2.1 Wechselwirkung endlicher Reichweite

Wie die Isingspinkette lässt sich in einer Dimension auch der Fall translationsinvarianter Wechselwirkungen endlicher Reichweite R und für r -wertige Spins E mit der Methode der Transfermatrizen behandeln. Der Einfachheit halber betrachten wir so genannte *periodische Randbedingungen* für die Spinkette der Länge $a > R$, setzen also $\Lambda(a) := \mathbb{Z}/a\mathbb{Z}$ und als Energiefunktion

$$H_{\Lambda(a)} : E^{\Lambda(a)} \rightarrow \mathbb{R} \quad , \quad H_{\Lambda(a)}(\sigma) := \sum_{l=1}^a \tilde{H}(\sigma_l, \sigma_{l+1}, \dots, \sigma_{l+R}). \quad (7.1)$$

Dabei lassen wir zu, dass $\tilde{H} : E^{R+1} \rightarrow \mathbb{R}$ in reell-analytischer Weise von Parametern wie der inversen Temperatur β abhängt.

Die Zustandssumme ist dann gleich

$$Z_{\Lambda(a)} := \sum_{\sigma \in E^{\Lambda(a)}} \exp(-H_{\Lambda(a)}(\sigma)) = \sum_{\sigma \in E^{\Lambda(a)}} \prod_{l=1}^a e^{-\tilde{H}(\sigma_l, \dots, \sigma_{l+R})}.$$

Da in (7.1) $(R+1)$ -Tupel von Spins vorkommen, setzen wir $\tilde{E} := E^R$. Dann ist mit der quadratischen *Transfermatrix*

$$T \in \mathcal{M}(\tilde{E}, \mathbb{R}^+) \quad , \quad T(\sigma, \tau) := \begin{cases} \exp(-\tilde{H}(\tau)) & , \sigma_i = \tau_{i+1} \quad (i = 1, \dots, R-1) \\ 0 & , \text{sonst} \end{cases}$$

und $Z_{\Lambda(a)} = \text{tr}(T^a)$. Für die Freie Energie ergibt sich

$$\begin{aligned} F_{\Lambda(a)} &:= \frac{1}{a} \ln Z_{\Lambda(a)} = -\frac{1}{a} \ln \left(\sum_{\lambda \in \text{spec}(T)} \lambda^a \right) \\ &= -\frac{1}{a} \ln \left(\lambda_{\max}^a \left(1 + \sum_{\lambda \neq \lambda_{\max}} (\lambda/\lambda_{\max})^a \right) \right) \end{aligned}$$

mit dem Perron–Frobenius–Eigenwert $\lambda_{\max} > 0$ von T (siehe Anhang **F**); aus der Definition von T ergibt sich, dass die Matrix T^R nur echt positive Einträge besitzt). Da diese Multiplizität Eins besitzt und die anderen Eigenwerte einen strikt kleineren Betrag besitzen, gilt

$$F = \lim_{a \rightarrow \infty} F_{\Lambda(a)} = \ln(\lambda_{\max}). \quad (7.2)$$

Da λ_{\max} nicht degeneriert ist, hängt er analytisch von den Matrixeinträgen $T(\sigma, \tau)$ ab. Dies ist eine Folgerung des Satzes über implizite Funktionen, denn die Koeffizienten des charakteristischen Polynoms sind Polynome in dem Matrixeinträgen.

Zusammenfassend ergibt sich:

7.5 Satz *Spinketten mit einer translationsinvarianten Wechselwirkung endlicher Reichweite besitzen (im Sinne einer analytischen Parameterabhängigkeit der Freien Energie (7.2)) keinen Phasenübergang.*

Allerdings lässt sich dieser Satz nicht auf translationsinvariante Potentiale unendlicher Reichweite übertragen, falls die Wechselwirkung nur langsam mit dem Abstand abfällt.

7.2.2 Wechselwirkung unendlicher Reichweite

Die meisten lösbaren Modelle mit Phasenübergang sind schwierig zu lösen (wie z.B. das zweidimensionale Isingmodell, siehe Kapitel **10**). Es existiert aber ein Gegenbeispiel, in dem auch das Nullstellenverhalten der Zustandssumme berechnet werden kann.

7.6 Beispiel Für $N \geq 2$ betrachten wir den Graphen (V, E) mit Vertexmenge $V := \{o, u, l, r\} \times \mathbb{Z}_N$ und Kantenmenge $E := E_v \dot{\cup} E_h \dot{\cup} E_d$, bestehend aus den *vertikalen*

$$E_v := \{(o, n), (u, n) \mid n \in \mathbb{Z}_N\},$$

den *horizontalen*

$$E_h := \{(r, n), (l, n + 1) \mid n \in \mathbb{Z}_N\}$$

und den *diagonalen* Kanten

$$E_d := \{(v, n), (h, n) \mid n \in \mathbb{Z}_N; v = u, o; h = l, r\},$$

siehe Abbildung **7.2**.

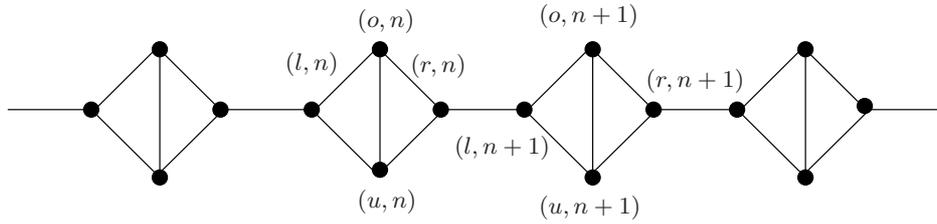


Abbildung 7.2: Ein Ausschnitt des Graphen (V, E)

Die Konfigurationen bestehen aus den perfekten Paarungen¹³ von (V, E) :

$$\Omega := \{\tilde{E} \subseteq E \mid \tilde{E} \text{ perfekte Paarung}\}.$$

Die Energiefunktion ist von der Form

$$H : \Omega \rightarrow \mathbb{R} \quad , \quad H(\tilde{E}) := \frac{\varepsilon}{2} |\tilde{E} \cap E_d|,$$

wobei $\varepsilon > 0$.

Damit gibt es genau eine Konfiguration $\tilde{E} \in \Omega$ mit Energie $H(\tilde{E}) = 0$, siehe Abbildung 7.3, und 2^N Konfigurationen mit Energie $N\varepsilon$, bei denen nämlich

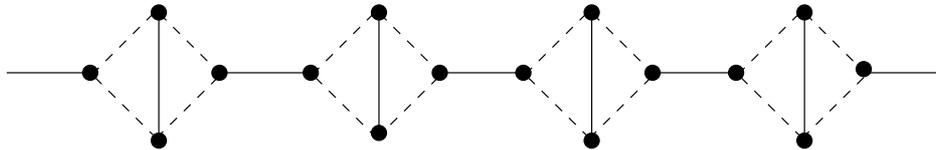


Abbildung 7.3: Die Konfiguration mit Energie 0

für jedes $n \in \mathbb{Z}_N$ ein Paar paralleler diagonalen Kanten besetzt ist, siehe z.B. Abbildung 7.4.

Die Zustandssumme ist also

$$Z_N(\beta) = \sum_{\tilde{E} \in \Omega} e^{-\beta H(\tilde{E})} = 1 + 2^N e^{-\beta N\varepsilon}.$$

¹³**Def.:** • Ein (*ungerichteter*) Graph G ist ein Zwei-Tupel $G = (V, E)$, wobei V eine Menge und E eine Teilmenge von $\{\{v_1, v_2\} \subseteq V \mid v_1 \neq v_2\}$ ist.

- V heißt *Knotenmenge* (englisch: vertex-set), $v \in V$ heißt *Knoten* oder *Ecke*. E heißt *Kantenmenge* (englisch: edge-set), $e \in E$ heißt *Kante*.
- Zwei Kanten $e_1 \neq e_2 \in E$ heißen *adjazent* wenn sie einen Knoten gemeinsam haben.
- Eine *Paarung* (engl. *matching*) des Graphen (V, E) ist eine Teilmenge $\tilde{E} \subseteq E$ der Kantenmenge E , in der keine zwei Kanten $e_1 \neq e_2 \in \tilde{E}$ adjazent sind.
- Die Paarung \tilde{E} heißt *perfekt*, wenn jeder Knoten $v \in V$ Element einer Kante $e \in \tilde{E}$ ist.

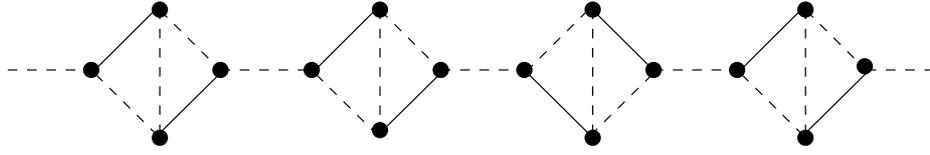


Abbildung 7.4: Eine Konfiguration mit Energie $N\varepsilon$

Die Dichte der Freien Energie wird damit

$$F_N(\beta) := -\frac{1}{N\beta} \ln(Z_N(\beta)) \quad (\beta > 0)$$

mit thermodynamischem Limes

$$F(\beta) := \lim_{N \rightarrow \infty} F_N(\beta) = \begin{cases} 0 & , \beta \geq \beta_{\text{cr}} \\ \varepsilon \left(1 - \frac{\beta_{\text{cr}}}{\beta}\right) & , \beta < \beta_{\text{cr}} \end{cases}$$

und kritischer inverser Temperatur $\beta_{\text{cr}} := \frac{\ln 2}{\varepsilon}$.

F zeigt bei β_{cr} einen Phasenübergang erster Ordnung, denn

$$\lim_{\beta \nearrow \beta_{\text{cr}}} F'(\beta) = \frac{\varepsilon^2}{\ln 2} > 0 = \lim_{\beta \searrow \beta_{\text{cr}}} F'(\beta).$$

Für $\beta > \beta_{\text{cr}}$ besitzt die aus horizontalen und vertikalen Kanten bestehende Konfiguration das asymptotische Gibbsmaß 1, während für $\beta < \beta_{\text{cr}}$ für jede durch $n \in \mathbb{Z}_N$ indizierte Zelle die beiden diagonalen Matchings jeweils Wahrscheinlichkeit $1/2$ besitzen, unabhängig für jede Zelle.

Der Erwartungswert $E_N(\beta) := \frac{1}{N} \langle H_N \rangle(\beta)$ der Energiedichte ist von der Form $E_N(\beta) = \frac{\varepsilon}{1 + 2^{-N} e^{\beta N \varepsilon}}$, woraus sich der thermodynamische Limes

$$E(\beta) := \lim_{N \rightarrow \infty} E_N(\beta) = \begin{cases} 0 & , \beta > \beta_{\text{cr}} \\ \varepsilon/2 & , \beta = \beta_{\text{cr}} \\ \varepsilon & , \beta < \beta_{\text{cr}} \end{cases}$$

ergibt.

Die Nullstellen der Zustandssumme stehen in enger Beziehung zum Phasenübergangspunkt β_{cr} . Für $\beta \in \mathbb{C}$ ist nämlich $Z_N(\beta)$ genau dann gleich 0, wenn $\beta = \beta_n$ für

$$\beta_n := \beta_{\text{cr}} + i \frac{(2n+1)\pi}{\varepsilon N} \quad (n \in \mathbb{Z}).$$

Wir sehen also, dass der Realteil der Nullstellen β_n gleich β_{cr} ist, während benachbarte Nullstellen einen Abstand von $\frac{2\pi}{\varepsilon N}$ besitzen, also im thermodynamischen Limes $N \rightarrow \infty$ immer dichter aneinander und an die reelle Achse rücken.

Dessen ungeachtet ist $Z_N(\beta_{cr})$ für alle N gleich 2.

7.7 Bemerkung Das vorgestellte Modell wird übrigens zur vereinfachten Modellierung des Phasenübergangs in einem KH_2PO_4 -Kristall benutzt, wobei sich die beiden H -Atome an vier Positionen der PO_4 -Gruppe anlagern können (nach CHANDLER [Ch]).

7.3 Definition asymptotischer Gibbsmaße

Wir werden im Verlauf der Vorlesung Techniken kennenlernen, mit denen die Parameterwerte, bei denen Phasenübergänge auftreten, lokalisiert werden. Entscheidend dafür wird die Frage sein, ob zu gegebenen Werten der Parameter ein oder mehrere Gibbsmaße existieren. Die Existenz mehrerer Gibbsmaße ist dann gleichbedeutend mit der Koexistenz verschiedener Phasen.

Für Systeme mit endlich vielen Teilchen haben wir Gibbsmaße über die Boltzmannfaktoren definiert, also die Energiefunktion benutzt. Zwar ist für unendliche Spinsysteme, z. B. solche auf einem Gitter \mathbb{Z}^d , die Energiefunktion nicht mehr wohldefiniert, der Ausdruck

$$H(\sigma) = - \sum_{\Lambda' \in \mathcal{S}} J(\Lambda') \sigma_{\Lambda'}$$

nur noch eine formale Summe. Dagegen sind *Energiedifferenzen* zwischen Konfigurationen σ^I und $\sigma^{II} \in \Omega$, die sich nur auf endlich vielen Gitterpunkten unterscheiden, wohldefiniert. Das werden wir uns zunutze machen.

Schauen wir uns zum Vergleich die Eigenschaften eines auf dem Konfigurationsraum $\Omega = E^s$, $|s| < \infty$, eines endlichen Spinsystems definierten Gibbsmaßes \mathbb{P} an. Mit der Energiefunktion $H : \Omega \rightarrow \mathbb{R}$ ist das Gibbsmaß \mathbb{P} auf Ω durch seine Werte

$$\mathbb{P}(\{\sigma\}) = \frac{e^{-H(\sigma)}}{\sum_{\sigma' \in \Omega} e^{-H(\sigma')}}$$

auf den einelementigen Ereignissen $\{\sigma\}$, $\sigma \in \Omega$ gegeben (dabei haben wir H durch $\beta \cdot H$ ersetzt und so zur Vereinfachung der Diskussion die inverse Temperatur in die Energiefunktion absorbiert).

Während nun für unendlich viele Spins die Energiefunktion H nicht mehr definiert ist, bleiben (bei genügendem Abfall des Potentials) die Energiefunktionen H_Λ^τ für endliche Gebiete $\Lambda \in \mathcal{S}$ und Randbedingungen $\tau \in E^{\Lambda^c}$ endlich.

Wahrscheinlichkeitstheoretisch führt die Voraussetzung einer Randbedingung $\tau \in E^{\Lambda^c}$ auf den Begriff der bedingten Wahrscheinlichkeit.

7.8 Definition Seien $(\Omega, \mathcal{F}, \mathbb{P})$ ein Wahrscheinlichkeitsraum und $A, B \in \mathcal{F}$ Ereignisse mit $\mathbb{P}(B) > 0$. Dann heißt

$$\mathbb{P}(A | B) := \frac{\mathbb{P}(A \cap B)}{\mathbb{P}(B)}$$

bedingte Wahrscheinlichkeit von A unter der Hypothese B .

7.9 Beispiel (Idealer Würfel) Die Augenzahlen $\Omega := \{1, 2, 3, 4, 5, 6\}$ sind also gleichwahrscheinlich, d. h. $\mathbb{P}(\{i\}) := \frac{1}{6}$, $i = 1, \dots, 6$. Dann ist für $A := \{2, 4, 6\}$ und $B := \{2, 3, 5\}$

$$\mathbb{P}(A | B) = \mathbb{P}(\{2\})/\mathbb{P}(B) = \frac{1}{3}.$$

Die bedingte Wahrscheinlichkeit, dass eine gerade Zahl fällt unter der Hypothese, dass eine Primzahl fällt, beträgt also $\frac{1}{3}$.

Um nun einzusehen, warum Randbedingungen $\tau \in E^{\Lambda^c}$, $E := \{-1, 1\}$, auf bedingte Wahrscheinlichkeiten führen, müssen wir zunächst klären, weshalb und in welchem Sinn τ auch als Ereignis in Ω aufgefasst werden kann.

Etwas allgemeiner sei $A \subseteq S$ eine beliebige Teilmenge einer Menge S und $A^c := S \setminus A$. Dann ist $\Omega = E^S$ isomorph zu $E^A \times E^{A^c}$. Ist nun $\omega \in \Omega$, so können wir diese Konfiguration ω in ihre Bestandteile auf A und auf A^c zerlegen: $\omega = (\sigma, \tau)$, $\sigma \in E^A$, $\tau \in E^{A^c}$.

Wir erhalten also für beliebige $A \subseteq S$ Projektionsabbildungen

$$\pi_A : \Omega \rightarrow E^A.$$

Ist insbesondere $\sigma \in E^A$ und $\tau \in E^{\Lambda^c}$, so sind $\pi_\Lambda^{-1}(\{\sigma\})$ und $\pi_{\Lambda^c}^{-1}(\{\tau\})$ Ereignisse in Ω . Der Einfachheit halber werden wir im Folgenden die Mengenklammern weglassen. $\pi_\Lambda^{-1}(\sigma)$ besteht also aus allen Konfigurationen $\omega \in \Omega$, deren Einschränkung auf Λ gleich σ ist.

Betrachten wir zunächst noch einmal den Fall endlich vieler Spins, denn dort wissen wir schon, wie wir Gibbsmaße definieren können.

7.10 Satz Es sei $\Omega := E^S$, $|S| < \infty$ und $H : \Omega \rightarrow \mathbb{R}$ von der Form

$$H(\omega) = - \sum_{\Lambda' \subseteq S} J(\Lambda') \omega_{\Lambda'}.$$

$\mathbb{P} : \mathcal{F} \rightarrow [0, 1]$ sei das Gibbsmaß zu H .

Für beliebige $\Lambda \subseteq S$ und $\tau \in E^{\Lambda^c}$ gilt dann

$$\mathbb{P}(\pi_\Lambda^{-1}(\sigma) | \pi_{\Lambda^c}^{-1}(\tau)) = \frac{\exp(-H_\Lambda^\tau(\sigma))}{\sum_{\sigma' \in E^\Lambda} \exp(-H_\Lambda^\tau(\sigma'))} \quad (\sigma \in E^\Lambda) \quad (7.3)$$

mit der Energiefunktion

$$H_\Lambda^\tau : E^\Lambda \rightarrow \mathbb{R} \quad , \quad H_\Lambda^\tau(\sigma) = - \sum_{\Lambda' \cap \Lambda \neq \emptyset} J(\Lambda')(\sigma, \tau)_{\Lambda'}.$$

7.11 Bemerkung Die rechte Seite der Gleichung (7.3) ist der mit der Zustands-
summe normierte Boltzmannfaktor der Konfiguration σ auf Λ für die Randbe-
dingung τ . Dieser Ausdruck wird auch im Fall eines unendlichen Gitters $S = \mathbb{Z}^d$
endlich bleiben. Wir werden in diesem Fall diejenigen Wahrscheinlichkeitsmaße \mathbb{P}
als Gibbsmaße bezeichnen, deren bedingte Wahrscheinlichkeiten die obige Form
besitzen.

Bew.: Die linke Seite der Gleichung ist $L := \mathbb{P}(\pi_\Lambda^{-1}(\sigma) \mid \pi_{\Lambda^c}^{-1}(\tau)) = \frac{\mathbb{P}(\{(\sigma, \tau)\})}{\mathbb{P}(\pi_{\Lambda^c}^{-1}(\tau))}$.
Nun ist der Zähler von der Form

$$\mathbb{P}(\{(\sigma, \tau)\}) = \frac{e^{-H(\sigma, \tau)}}{\sum_{\sigma' \in E^\Lambda} \sum_{\tau' \in E^{\Lambda^c}} e^{-H(\sigma', \tau')}}.$$

und der Nenner

$$\mathbb{P}(\pi_{\Lambda^c}^{-1}(\tau)) = \frac{\sum_{\sigma' \in E^\Lambda} e^{-H(\sigma', \tau)}}{\sum_{\sigma' \in E^\Lambda} \sum_{\tau' \in E^{\Lambda^c}} e^{-H(\sigma', \tau')}}.$$

sodass

$$\begin{aligned} L &= \frac{e^{-H(\sigma, \tau)}}{\sum_{\sigma' \in E^\Lambda} e^{-H(\sigma', \tau)}} = \frac{\exp\left(\sum_{\Lambda' \subseteq S} J(\Lambda') \cdot (\sigma, \tau)_{\Lambda'}\right)}{\sum_{\sigma' \in E^\Lambda} \exp\left(\sum_{\Lambda' \subseteq S} J(\Lambda') \cdot (\sigma', \tau)_{\Lambda'}\right)} \\ &= \frac{\exp\left(\sum_{\Lambda' \cap \Lambda \neq \emptyset} J(\Lambda') \cdot (\sigma, \tau)_{\Lambda'}\right)}{\sum_{\sigma' \in E^\Lambda} \exp\left(\sum_{\Lambda' \cap \Lambda \neq \emptyset} J(\Lambda') \cdot (\sigma', \tau)_{\Lambda'}\right)}, \end{aligned}$$

denn die Summanden mit $\Lambda' \subseteq \Lambda^c$ in Zähler und Nenner sind einander gleich
($(\sigma', \tau)_{\Lambda'} = \prod_{i \in \Lambda'} \tau_i$ hängt ja nicht mehr von den Spinwerten σ' im Gebiet Λ
ab).

$$\text{Damit ist aber } L = \frac{\exp(-H_\Lambda^\tau(\sigma))}{\sum_{\sigma' \in E^\Lambda} \exp(-H_\Lambda^\tau(\sigma'))}. \quad \square$$

7.12 Bemerkung Trivialerweise können wir für $|S| < \infty$ das Gibbsmaß \mathbb{P} zum
Potential J eindeutig als dasjenige Wahrscheinlichkeitsmaß auf Ω definieren,
dessen bedingte Wahrscheinlichkeiten die Form (7.3) haben. Denn wählen wir
 $\Lambda := S$, so ist Λ^c die leere Menge, sodass die Hypothese gleich Ω ist. Es gilt
aber allgemein die Beziehung $\mathbb{P}(A \mid \Omega) = \frac{\mathbb{P}(A \cap \Omega)}{\mathbb{P}(\Omega)} = \frac{\mathbb{P}(A)}{\mathbb{P}(\Omega)} = \mathbb{P}(A)$.

Wir erhalten also auf diese Weise die (eindeutige) Definition des Gibbsmaßes
zurück.

Wir betrachten nun Potentiale $J : \mathcal{S}(d) \rightarrow \mathbb{R}$ auf \mathbb{Z}^d mit $\|J\| < \infty$, siehe (5.7). Für diese sind die Energiefunktionen auf $\Lambda \in \mathcal{S}(d)$

$$H_\Lambda^\tau : E^\Lambda \rightarrow \mathbb{R} \quad , \quad H_\Lambda^\tau(\sigma) = - \sum_{\Lambda' \in \mathcal{S}(d) : \Lambda' \cap \Lambda \neq \emptyset} J(\Lambda') (\sigma, \tau)_{\Lambda'}$$

für beliebige Randbedingungen $\tau \in E^{\Lambda^c}$ wohldefiniert.

7.13 Definition Ein Wahrscheinlichkeitsmaß \mathbb{P} auf $\Omega := E^{(\mathbb{Z}^d)}$ heißt **(asymptotisches) Gibbsmaß bezüglich J** , wenn für alle $\Lambda \in \mathcal{S}$ gilt: \mathbb{P} -fast sicher bezüglich $(\sigma, \tau) \in E^\Lambda \times E^{\Lambda^c} \equiv \Omega$ ist

$$\mathbb{P}(\pi_\Lambda^{-1}(\sigma) \mid \pi_{\Lambda^c}^{-1}(\tau)) = \frac{\exp(-H_\Lambda^\tau(\sigma))}{\sum_{\sigma' \in E^\Lambda} \exp(-H_\Lambda^\tau(\sigma'))}$$

Die Menge der Gibbsmäße bezüglich J bezeichnen wir mit $\mathcal{G}(J)$.

7.14 Bemerkungen 1. Wieder wurde Einfachheit halber die inverse Temperatur β in J absorbiert.

2. Da $\Lambda^c = \mathbb{Z}^d \setminus \Lambda$ aus unendlich vielen Gitterpunkten besteht, wird im Allgemeinen die Wahrscheinlichkeit $\mathbb{P}(\pi_{\Lambda^c}^{-1}(\tau))$ der Hypothese Null sein, sodass wir für gegebenes Wahrscheinlichkeitsmaß \mathbb{P} die bedingten Wahrscheinlichkeiten nicht mehr wie in Def. 7.8 definieren können. Es ist aber trotzdem möglich, bedingte Wahrscheinlichkeiten \mathbb{P} "fast sicher" zu definieren.

Die mathematische Definition ist im Prinzip nicht kompliziert, aber langwierig. Man kann sie z. B. in BAUER [Ba], § 15 nachlesen.

Wir werden uns in den Anwendungen nur auf Potentiale endlicher Reichweite beschränken. In diesem Fall hängt H_Λ^τ in Wirklichkeit nur von endlich vielen Spins im Außengebiet Λ^c ab. Daher können wir uns bei der Bildung der bedingten Wahrscheinlichkeiten auch auf Hypothesen beschränken, in denen wir nur diese endlich vielen Spins fixieren, sodass die Wahrscheinlichkeit dieser Hypothese größer als Null werden wird, falls \mathbb{P} der definierenden Gleichung genügt.

3. $\mathcal{G}(0)$ besteht nur aus dem Produktmaß $\otimes_{\ell \in \mathbb{Z}^d} \mu$ des Laplace-Wahrscheinlichkeitsmaßes μ auf E , denn in diesem Fall sind die bedingten Wahrscheinlichkeiten $|E|^{-|\Lambda|}$ der Spinkonfigurationen $\sigma \in E^\Lambda$ unabhängig von der durch die Randbedingungen gegebenen Hypothese, also gleich den Wahrscheinlichkeiten der σ .

4. $\mathcal{G}(J)$ kann jetzt im Prinzip leer sein (es existiert kein Gibbsmaß) oder auch aus mehr als einem Element bestehen.

Wir werden im nächsten Kapitel zunächst zeigen, dass für translationsinvariante Potentiale auf \mathbb{Z}^d endlicher Reichweite $\mathcal{G}(J) \neq \emptyset$ ist und dann Fälle diskutieren, wo genau ein oder auch mehrere Gibbsmaße existieren.

7.4 Existenz und Struktur asymptotischer Gibbsmaße

Unsere Hauptaufgabe wird im Weiteren die Analyse der Menge $\mathcal{G}(J)$ der Gibbsmaße für Potential J sein (dabei werden wir ab jetzt immer voraussetzen, dass J translationsinvariant und von endlicher Reichweite ist).

Es liegt nun nahe, für endliche, aber gegen \mathbb{Z}^d wachsende Bereiche $\Lambda \subseteq \mathbb{Z}^d$ Gibbsmaße mit Randbedingungen zu konstruieren und danach Gibbsmaße auf ganz \mathbb{Z}^d durch einen geeigneten Limes zu finden.

Wenn wir mit $M(\Omega)$ die Menge der Wahrscheinlichkeitsmaße auf Ω bezeichnen, dann suchen wir Limespunkte $\mathbb{P} \in M(\Omega)$. Dazu müssen wir aber zunächst einmal eine Topologie auf $M(\Omega)$ definieren.

Die Wahl dieser Topologie ist physikalisch motiviert. Wir wollen ja die Gibbsmaße dazu benutzen, die Erwartungswerte von Observablen zu berechnen.

Für klassische Spins betrachten wir

$$\Omega := E^S \quad \text{mit} \quad |E| < \infty, \quad \text{z.B.} \quad E = \{-1, 1\},$$

wobei S zunächst eine beliebige abzählbare Menge sein kann, in den späteren Anwendungen aber $S := \mathbb{Z}^d$.

Wir wählen auf E die diskrete Topologie (in der alle Teilmengen von E offen sind). Dann wählen wir (da wir alle Spins gleichbehandeln wollen) auf Ω die *Produkttopologie* (also die grösste Topologie unter der die Projektion auf die einzelnen Faktoren stetig ist, siehe Seite 50).

Eine Basis dieser Topologie bilden die "offenen Kästchen" $\pi_\Lambda^{-1}(U)$, wobei $\Lambda \in \mathcal{S} = \{\Lambda \subseteq S \mid 0 < |\Lambda| < \infty\}$ und $U \subseteq E^\Lambda$ ist. Wir sagen also nur etwas über die Spinwerte in Λ aus.

Nun betrachten wir die Observablenalgebra, also den \mathbb{C} -Vektorraum $C(\Omega)$ der stetigen Funktionen auf Ω mit punktweiser Addition und Multiplikation.

7.15 Definition Die **schwach-*-Topologie** oder auch **vage Topologie** auf $M(\Omega)$ ist die grösste Topologie auf $M(\Omega)$, für die die Abbildungen $\mu \mapsto \int_\Omega f d\mu$ für alle $f \in C(\Omega)$ stetig sind.

7.16 Satz In der schwach-*-Topologie ist $M(\Omega)$ kompakt.

Bew.: Zunächst ist nach dem Satz von Tychonoff Ω als Produkt kompakter Hausdorffräume kompakt und ein Hausdorffraum, siehe die Bemerkungen 5.7.2 und 5.7.3.

Die positiven linearen identitätserhaltenden Funktionale auf $C(\Omega)$ können also nach dem Satz von Riesz-Markov¹⁴ mit den Wahrscheinlichkeitsmaßen identifiziert werden¹⁵. $M(\Omega)$ lässt sich damit als Teilmenge des Dualraums $C(\Omega)^*$ von $C(\Omega)$ auffassen. Sie ist eine abgeschlossene konvexe Teilmenge der Einheitskugel von $C(\Omega)^*$.

Da letztere nach dem Satz von Banach-Alaoglu¹⁶ schwach-*-kompakt ist, folgt gleiches für $M(\Omega)$. \square

Wir wollen jetzt die Kompaktheit von $M(\Omega)$ ausnutzen, um die Existenz von Gibbsmaßen auf Ω zu zeigen, genauer gesagt, um Gibbsmaße auf Ω zu konstruieren. Wir gehen dabei von Maßen $\mathbb{P}_i \in M(\Omega)$ aus, die zwar selbst noch keine Gibbsmaße sind, deren bedingte Wahrscheinlichkeiten aber auf mit i wachsenden Gebieten die gewünschte Form besitzen.

Wir wählen dazu eine im folgenden Sinn gegen die ganze Menge \mathcal{S} gehende Folge $\{\Lambda_i\}_{i \in \mathbb{N}}$ von endlichen Teilmengen $\Lambda_i \in \mathcal{S}$:

1. $\Lambda_{i+1} \supset \Lambda_i \quad (i \in \mathbb{N})$
2. Für alle $\Lambda \in \mathcal{S}$ existiert ein $\Lambda_i \supset \Lambda$.

Weder erfüllen van-Hove-Folgen i.A. diese Bedingungen noch umgekehrt.

Ein jedes solches Gebiet Λ_i induziert eine Aufspaltung von Ω in das kartesische Produkt $\Omega = E^{\Lambda_i} \times E^{\Lambda_i^c}$.

Wir wählen jetzt pro Gebiet eine *Randbedingung* $\rho_i \in E^{\Lambda_i^c}$ und setzen für $\omega = (\sigma, \tau) \in E^{\Lambda_i} \times E^{\Lambda_i^c}$

$$\mathbb{P}_i(\{\omega\}) := \frac{\exp(-H_{\Lambda_i}^{\rho_i}(\sigma))}{\sum_{\sigma' \in E^{\Lambda_i}} \exp(-H_{\Lambda_i}^{\rho_i}(\sigma'))} \cdot \delta(\tau, \rho_i)$$

mit

$$\delta(\tau, \rho_i) = \begin{cases} 1 & , \quad \tau = \rho_i \\ 0 & , \quad \text{sonst.} \end{cases}$$

Diese Definition ist so gemacht, dass $\mathbb{P}_i \in M(\Omega)$.

¹⁴**Satz von Riesz-Markov:** Es sei Ω ein kompakter Hausdorffraum. Dann gibt es für jedes positive lineare Funktional $\ell : C(\Omega) \rightarrow \mathbb{C}$ ein eindeutiges Bairemaß μ auf Ω mit $\ell(f) = \int_{\Omega} f d\mu$.

¹⁵In unserem Fall kommt die Topologie auf $M(\Omega)$ von einer Metrik; Bairemengen sind damit Borelmengen und umgekehrt.

Eine ausführlichere Diskussion findet man in Kap. IV.4 von REED und SIMON [RS].

¹⁶**Satz von Banach-Alaoglu:** Die Einheitskugel des Dualraumes X^* eines Banachraumes X ist schwach-*-kompakt. Einen Beweis findet man z.B. [RS], p. 115.

Da es sich bei den \mathbb{P}_i um Wahrscheinlichkeitsmaße auf Ω handelt und $M(\Omega)$ schwach-*-kompakt ist, muss die Folge der \mathbb{P}_i einen Häufungspunkt \mathbb{P} besitzen¹⁷. Durch Auswahl einer Teilfolge können wir erreichen, dass

$$\mathbb{P} = w^*\text{-}\lim_{i \rightarrow \infty} \mathbb{P}_i$$

(hierbei steht w für *weak*).

7.17 Satz \mathbb{P} ist ein Gibbsmaß bezüglich des Potentials J .

Bew.: Wir haben vorausgesetzt, dass das Potential J eine endliche Reichweite R hat. Betrachten wir, wie in Def. 7.13 gefordert, Spins in einem Gebiet $\Lambda \in \mathcal{S}$, dann wechselwirken diese höchstens mit Spins in $\Xi := \{\ell \in \mathbb{Z}^d \mid d(\ell, \Lambda) \leq R\}$. Es genügt also, Randbedingungen in $\Theta := \Xi - \Lambda$ festzulegen und zu kontrollieren,

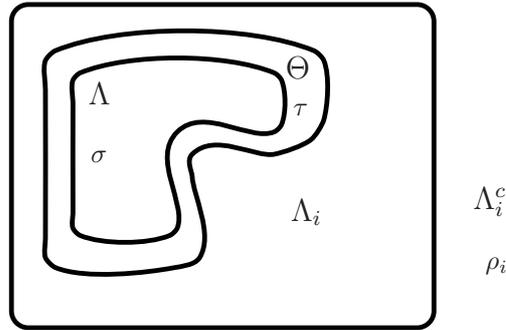


Abbildung 7.5: Konfiguration $\sigma \in E^\Lambda$ mit Randbedingungen $\tau \in E^\Theta$; Gibbsmaß \mathbb{P}_i auf Λ_i mit Randbedingungen $\rho_i \in E^{\Lambda_i^c}$

dass die entsprechenden bedingten Wahrscheinlichkeiten die gewünschte Form besitzen, dass also für $\tau \in E^\Theta$

$$L(\sigma) := \mathbb{P}(\pi_\Lambda^{-1}(\sigma) \mid \pi_\Theta^{-1}(\tau)) = \frac{\exp(-H_\Lambda^\tau(\sigma))}{\sum_{\sigma' \in E^\Lambda} \exp(-H_\Lambda^\tau(\sigma'))} \quad (\sigma \in E^\Lambda)$$

gilt.

Nun finden wir, da die Folge der Λ_i nach unendlich strebt, bei jeder Wahl von Λ (und damit Ξ) ein i_0 mit $\Xi \subseteq \Lambda_i$ für alle $i \geq i_0$ (siehe Abb. 7.5).

Für diese Indices ist

$$L_i(\sigma) := \mathbb{P}_i(\pi_\Lambda^{-1}(\sigma) \mid \pi_\Theta^{-1}(\tau)) = \frac{\mathbb{P}_i(\pi_\Xi^{-1}(\sigma, \tau))}{\mathbb{P}_i(\pi_\Theta^{-1}(\tau))}.$$

¹⁷Da die vage Topologie auf $M(\Omega)$ von einer Metrik erzeugt wird (siehe WALTER [Wa], Thm. 6.4) sind für $M(\Omega)$ Kompaktheit und Folgenkompaktheit äquivalente Begriffe

Der Zähler ist von der Form

$$\mathbb{P}_i(\pi_{\Xi}^{-1}(\sigma, \tau)) = \frac{\sum_{\chi' \in E^{\Lambda_i - \Xi}} \exp(-H_{\Lambda_i}^{\rho_i}(\sigma, \tau, \chi'))}{\sum_{\sigma' \in E^{\Lambda}} \sum_{\tau' \in E^{\Theta}} \sum_{\chi' \in E^{\Lambda_i - \Xi}} \exp(-H_{\Lambda_i}^{\rho_i}(\sigma', \tau', \chi'))}, \quad (7.4)$$

der Nenner

$$\mathbb{P}_i(\pi_{\Theta}^{-1}(\tau)) = \frac{\sum_{\sigma' \in E^{\Lambda}} \sum_{\chi' \in E^{\Lambda_i - \Xi}} \exp(-H_{\Lambda_i}^{\rho_i}(\sigma', \tau, \chi'))}{\sum_{\sigma' \in E^{\Lambda}} \sum_{\tau' \in E^{\Theta}} \sum_{\chi' \in E^{\Lambda_i - \Xi}} \exp(-H_{\Lambda_i}^{\rho_i}(\sigma', \tau', \chi'))}. \quad (7.5)$$

Damit wird wegen der Gleichheit der Zustandssummen in (7.4) und (7.5)

$$\begin{aligned} L_i(\sigma) &= \frac{\sum_{\chi' \in E^{\Lambda_i - \Xi}} \exp(-H_{\Lambda_i}^{\rho_i}(\sigma, \tau, \chi'))}{\sum_{\sigma' \in E^{\Lambda}} \sum_{\chi' \in E^{\Lambda_i - \Xi}} \exp(-H_{\Lambda_i}^{\rho_i}(\sigma', \tau, \chi'))} \\ &= \frac{\sum_{\chi' \in E^{\Lambda_i - \Xi}} \exp\left(\sum_{\Lambda' \cap \Lambda_i \neq \emptyset} J(\Lambda')(\sigma, \tau, \chi', \rho_i)_{\Lambda'}\right)}{\sum_{\chi' \in E^{\Lambda_i - \Xi}} \sum_{\sigma' \in E^{\Lambda}} \exp\left(\sum_{\Lambda' \cap \Lambda_i \neq \emptyset} J(\Lambda')(\sigma', \tau, \chi', \rho_i)_{\Lambda'}\right)} \\ &= \frac{\exp\left(\sum_{\Lambda' \cap \Lambda \neq \emptyset} J(\Lambda')(\sigma, \tau)_{\Lambda'}\right)}{\sum_{\sigma' \in E^{\Lambda}} \exp\left(\sum_{\Lambda' \cap \Lambda \neq \emptyset} J(\Lambda')(\sigma', \tau)_{\Lambda'}\right)} = \frac{e^{-H_{\Lambda}^{\tau}(\sigma)}}{\sum_{\sigma' \in E^{\Lambda}} e^{-H_{\Lambda}^{\tau}(\sigma')}}. \end{aligned}$$

Die vorletzte Identität folgt durch Betrachtung derjenigen in den Argumenten der Exponentialfunktionen auftretenden Summanden, für die $\Lambda' \cap \Lambda_i \neq \emptyset$, aber $\Lambda' \cap \Lambda = \emptyset$ ist. Diese kommen in jedem Term von Zähler und Nenner vor und lassen sich daher herauskürzen.

Insbesondere ist L_i von i unabhängig, sodass der Limes L existiert. Damit ist aber \mathbb{P} ein Gibbsmaß. \square

Es gilt übrigens auch, dass sich alle Gibbsmaße so konstruieren lassen (siehe z. B. PRUM und FORT [PF])!

7.18 Korollar $\mathcal{G}(J) \neq \emptyset$.

7.19 Bemerkung Dass für Spinmodelle immer ein Gibbsmaß existiert, ist keineswegs a priori selbstverständlich. Es gibt nämlich andere Modelle der Statistischen Mechanik, für die kein Gibbsmaß existiert.

Das *diskrete gaußsche Modell* auf dem Gitter \mathbb{Z}^d ist ein solches Beispiel. Hier kann der einzelne Spin Werte in $E := \mathbb{Z}$ annehmen, wir setzen also $\Omega := E^{(\mathbb{Z}^d)}$. Die Energiefunktion ist damit (als formale Summe aufgefasst)

$$H(\omega) = \frac{1}{2} \sum_{\substack{i, k \in \mathbb{Z}^d \\ \|i - k\|_1 = 1}} (\omega_i - \omega_k)^2 \quad (\omega \in \Omega).$$

Es stellt sich heraus, dass für $d = 1$ kein Gibbsmaß existiert, während für $d \geq 2$ und tiefe Temperaturen sogar unendlich viele extremale Gibbsmäße existieren.

Der anschauliche Grund für dieses Verhalten ist die Tatsache, dass die Boltzmannfaktoren für Konfigurationen ω der Art

$$\cdots \quad a \quad a \quad a \quad a+1 \quad a+1 \quad a+1 \quad \cdots$$

positiv sind ($a \in \mathbb{Z}$ beliebig), während sie in höheren Dimensionen für Konfigurationen der Form

$$\begin{array}{cccccccc} \cdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \cdots \\ \cdots & a & a & a & a+1 & a+1 & a+1 & \cdots \\ \cdots & a & a & a & a+1 & a+1 & a+1 & \cdots \\ \cdots & a & a & a & a+1 & a+1 & a+1 & \cdots \\ \cdots & a & a & a & a+1 & a+1 & a+1 & \cdots \\ \cdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \cdots \end{array}$$

Null sind.

Natürlich funktioniert für das diskrete gaußsche Modell unser Beweis der Existenz eines Gibbsmaßes nicht mehr, denn schon der Wertebereich $E = \mathbb{Z}$ eines einzelnen Spins ist (bez. der diskreten Topologie) keine kompakte Menge mehr.

Die Struktur der Menge $\mathcal{G}(J)$ der Gibbsmäße für Potentiale J auf \mathbb{Z}^d wird in folgendem Satz beschrieben.

7.20 Satz $\mathcal{G}(J)$ ist eine kompakte konvexe Menge.

Bew.: • Offenbar sind Häufungspunkte von Gibbsmaßen wieder Gibbsmäße, $\mathcal{G}(J)$ also abgeschlossen und damit als Teilmenge der kompakten Menge $M(\Omega)$ kompakt.

• Die Konvexität soll für den Fall eines Potentials J endlicher Reichweite R bewiesen werden. Der Fall unendlicher Reichweite ergibt sich dann mit einem Approximationsargument. Seien also \mathbb{P}_0 und $\mathbb{P}_1 \in \mathcal{G}(J)$ und

$$\mathbb{P}_\lambda := (1 - \lambda)\mathbb{P}_0 + \lambda\mathbb{P}_1 \quad (\lambda \in [0, 1]).$$

Damit ist $\mathbb{P}_\lambda \in M(\Omega)$. Für $\Lambda \in \mathcal{S}$ hat die endliche Teilmenge $\tilde{\Lambda}^c \subseteq \Lambda^c$,

$$\tilde{\Lambda}^c := \{\ell \in \Lambda^c \mid d(\ell, \Lambda) \leq R\}$$

die Eigenschaft $J(\Lambda') = 0$ für alle $\Lambda' \in \mathcal{S}$ mit $\Lambda' \cap \Lambda \neq \emptyset$ und $\Lambda' \cap (\Lambda^c - \tilde{\Lambda}^c) \neq \emptyset$. Denn solche Mengen Λ' besitzen Durchmesser $\text{diam}(\Lambda') > R$. Daher genügt es, Randbedingungen $\tau \in E^{\tilde{\Lambda}^c}$ festzulegen.

Ist nun $\mathbb{P}_0\left(\pi_{\tilde{\Lambda}^c}^{-1}(\tau)\right) > 0$ und $\mathbb{P}_1\left(\pi_{\tilde{\Lambda}^c}^{-1}(\tau)\right) > 0$, so folgt daraus

$$\mathbb{P}_\lambda\left(\pi_{\tilde{\Lambda}^c}^{-1}(\tau)\right) > 0.$$

Ist $\sigma \in E^\Lambda$, so gilt mit $A := \pi_\Lambda^{-1}(\sigma)$, $B := \pi_{\tilde{\Lambda}^c}^{-1}(\tau)$

$$\begin{aligned} \mathbb{P}_\lambda\left(\pi_\Lambda^{-1}(\sigma) \mid \pi_{\tilde{\Lambda}^c}^{-1}(\tau)\right) &= \frac{\mathbb{P}_\lambda(A \cap B)}{\mathbb{P}_\lambda(B)} \\ &= \frac{(1-\lambda)\mathbb{P}_0(A \cap B) + \lambda\mathbb{P}_1(A \cap B)}{(1-\lambda)\mathbb{P}_0(B) + \lambda\mathbb{P}_1(B)} \\ &= \frac{\exp(-H_\Lambda^\tau(\sigma))}{\sum_{\sigma' \in E^\Lambda} \exp(-H_\Lambda^\tau(\sigma'))} =: x, \end{aligned}$$

denn nach Voraussetzung gilt für $i = 0$ und $i = 1$

$$\mathbb{P}_i(A \cap B) = x \mathbb{P}_i(B).$$

□

7.21 Beispiel Für das Isingmodell ohne äußeres Magnetfeld auf \mathbb{Z}^2 stellt sich heraus, dass für $\beta > \beta_{\text{cr}}$ d. h. niedrige Temperaturen

$$\mathcal{G}(\beta J) = \{\lambda \mathbb{P}_\beta^+ + (1-\lambda) \mathbb{P}_\beta^- \mid \lambda \in [0, 1]\}$$

die Form einer Strecke hat, deren Endpunkte \mathbb{P}_β^+ und \mathbb{P}_β^- translationsinvariante Maße mit Erwartungswerten

$$\langle s_\ell \rangle_{\mathbb{P}_\beta^+} = -\langle s_\ell \rangle_{\mathbb{P}_\beta^-} > 0 \quad (\ell \in \mathbb{Z}^2)$$

sind; dabei ist $s_\ell : \Omega \rightarrow \{-1, 1\}$, $\omega \mapsto \omega_\ell$ der Wert des Spins an der Stelle $\ell \in \mathbb{Z}^2$. Der (ℓ -unabhängige) Erwartungswert ist damit der Wert der spontanen Magnetisierung

$$M := \lim_{\Lambda \rightarrow \infty} \frac{1}{|\Lambda|} \sum_{\ell \in \Lambda} s_\ell.$$

Das Maß $\frac{1}{2}(\mathbb{P}_\beta^+ + \mathbb{P}_\beta^-)$ ist zwar ein Gibbsmaß, aber kein reines.

Das obige Beispiel suggeriert, dass die Menge

$$\text{Ex}(\mathcal{G}(J)) := \{\mathbb{P} \in \mathcal{G}(J) \mid \mathbb{P} \text{ extremal in } \mathcal{G}(J)\}$$

der *reinen Gibbsmaße zum Potential J* besonders wichtig ist.

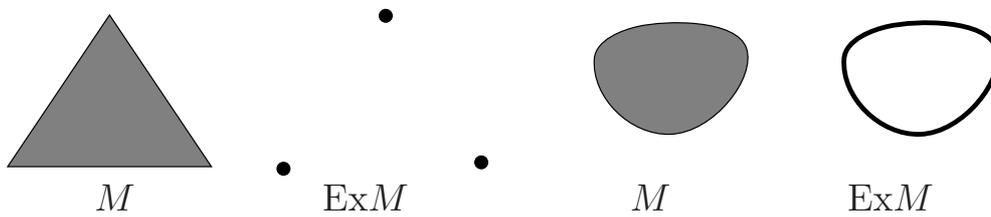


Abbildung 7.6: Simplex (links) und allgemeine kompakte konvexe Menge (rechts)

Von kompakten konvexen Mengen $K \subseteq \mathbb{R}^n$ sind wir ja gewohnt, dass sie die abgeschlossene konvexe Hülle ihrer Extrempunkte $\text{Ex}(K)$ sind, sich die Menge also aus ihren Extrempunkten rekonstruieren lässt.

Wegen des Satzes von Krein-Milman¹⁸ gilt entsprechendes auch für unseren Fall. $\mathcal{G}(J)$ ist sogar ein *Simplex*, sodass sich jedes Gibbsmaß *eindeutig* als Konvexkombination reiner Gibbsmäße darstellen lässt, siehe z. B. SIMON [Sim].

Es ist natürlich ökonomischer einen Simplex nur durch seine Eckpunkte zu charakterisieren.

Aber auch vom physikalischen Blickwinkel aus interessieren uns zunächst nur die reinen Gibbsmäße. Es lässt sich nämlich zeigen, dass genau für die *reinen* Gibbsmäße alle makroskopischen Größen (wie die mittlere Magnetisierung M aus Bsp. 7.21) schwankungsfrei sind, also die Varianz Null aufweisen (siehe RUELLE [Ru], Chapter 6).

Die Erfahrung zeigt aber, dass alle makroskopischen Maßgrößen schwankungsfrei sind. Im Experiment hat man es also nur mit extremalen = reinen Gibbsmäßen zu tun. Physikalisch werden diese als *Phasen* bezeichnet. Werden in der theoretischen Physik auch nicht extremale Gibbsmäße behandelt, so beschreiben sie die *Unkenntnis über den wirklichen Zustand*.

7.22 Beispiel 1. Isingmodell auf \mathbb{Z}^2 , siehe Bsp. 7.21.

Wir betrachten als makroskopische Observable die mittlere Magnetisierung

$$M : E^{\mathbb{Z}^2} \rightarrow [-1, 1] \quad , \quad M(\omega) = \limsup_{n \rightarrow \infty} \frac{1}{|\Lambda_n|} \sum_{k \in \Lambda_n} \omega_k.$$

Der Erwartungswert $\langle s_\ell \rangle_{\mathbb{P}_\beta^+}$ ist unabhängig von $\ell \in \mathbb{Z}^2$, für große β ist

$$m := \langle M \rangle_{\mathbb{P}_\beta^+} \equiv \langle s_\ell \rangle_{\mathbb{P}_\beta^+} > 0, \quad (7.6)$$

¹⁸**Satz von Krein-Milman:** Eine nicht leere kompakte konvexe Teilmenge K eines lokal-konvexen Raumes ist die *abgeschlossene konvexe Hülle* ihrer Extrempunkte $\text{Ex}(K)$ (d. h. die kleinste abgeschlossene konvexe Menge, die $\text{Ex}(K)$ enthält).

und die Varianz eines beliebigen Gibbsmaßes

$$\mathbb{P}_\lambda := (1 - \lambda)\mathbb{P}_\beta^+ + \lambda\mathbb{P}_\beta^- \in \mathcal{G}(\beta J)$$

ist

$$\mathbb{V}_{\mathbb{P}_\lambda}(M) = \langle M^2 \rangle_{\mathbb{P}_\lambda} - \langle M \rangle_{\mathbb{P}_\lambda}^2. \quad (7.7)$$

Für die reinen Phasen \mathbb{P}_β^\pm läßt sich zeigen, dass weit entfernte Spins unkorreliert sind, d. h.

$$\lim_{\ell \rightarrow \infty} \langle s_\ell s_0 \rangle_{\mathbb{P}_\beta^\pm} = \lim_{\ell \rightarrow \infty} \langle s_\ell \rangle_{\mathbb{P}_\beta^\pm} \langle s_0 \rangle_{\mathbb{P}_\beta^\pm} = \langle s_0 \rangle_{\mathbb{P}_\beta^\pm}^2 = m^2.$$

Daher gilt (unter Benutzung der Translationsinvarianz)

$$\langle M^2 \rangle_{\mathbb{P}_\beta^\pm} = \lim_{\Lambda \rightarrow \infty} \frac{1}{|\Lambda|} \sum_{\ell \in \Lambda} \langle s_\ell s_0 \rangle_{\mathbb{P}_\beta^\pm} = m^2,$$

sodass wegen (7.7)

$$\begin{aligned} \mathbb{V}_{\mathbb{P}_\lambda}(M) &= (1 - \lambda) \langle M^2 \rangle_{\mathbb{P}_\beta^+} + \lambda \langle M^2 \rangle_{\mathbb{P}_\beta^-} - \left((1 - \lambda) \langle M \rangle_{\mathbb{P}_\beta^+} + \lambda \langle M \rangle_{\mathbb{P}_\beta^-} \right)^2 \\ &= m^2 - ((1 - \lambda)m + \lambda m)^2 = 4\lambda(1 - \lambda)m^2 \geq 0. \end{aligned}$$

Wegen (7.6) verschwindet damit genau für die reinen Gibbsmaße \mathbb{P}_β^\pm die Varianz der mittleren Magnetisierung.

2. Für Wasser am Gefrierpunkt existieren die extremalen Gibbsmaße = Phasen Wasser und Eis. Eine Mischung zwischen diesen extremalen Gibbsmaßen entspricht der Unkenntnis, ob Wasser oder Eis vorliegt und beschreibt *nicht* Wasser, auf dem Eis schwimmt. Letztere Zustände können sehr wohl durch weitere extremale, aber *nicht translationsinvariante* Gibbsmaße beschrieben sein, siehe Kap. 8.3.

8 Existenz von Phasenübergängen

8.1 Das Peierls-Argument	94
8.2 Korrelationsungleichungen	102
8.3 3-D Isingmodell: Nicht translationsinvariante Phasen . . .	107

8.1 Das Peierls-Argument

Schon vor der Berechnung der Freien Energie des zweidimensionalen Isingmodells durch Onsager (veröffentlicht 1944) bewies Peierls (1936) die Existenz zweier Phasen für tiefe Temperaturen. Es erwies sich, dass die von ihm verwendete Methode auch auf viele andere Modelle der Statistischen Mechanik anwendbar ist. In der Literatur wird die zugrundeliegende Idee das "Peierls-Argument" genannt. Wir wollen es zunächst für das zweidimensionale Isingmodell betrachten und danach klären, welche Verallgemeinerungen möglich sind.

Das zweidimensionale Isingmodell ohne äußeres Magnetfeld und mit ferromagnetischer Nächste-Nachbar-Wechselwirkung der Stärke $j > 0$ wird durch das Potential J auf \mathbb{Z}^2 mit

$$J(\Lambda) := \begin{cases} j & , \Lambda = \{i, k\} \quad \text{mit} \quad \|i - k\|_1 = 1 \\ 0 & , \text{sonst} \end{cases}$$

definiert. Zur Abwechslung absorbieren wir die Wechselwirkungskonstante j in der inversen Temperatur β , setzen also $j := 1$. Bezeichnen wir die beiden "Grundzustandskonfigurationen" der Wechselwirkung mit $\omega^\pm \in \Omega := E^{(\mathbb{Z}^2)}$,

$$\omega_\ell^+ := 1 \quad , \quad \omega_\ell^- := -1 \quad (\ell \in \mathbb{Z}^2),$$

so ist klar, dass alle anderen Konfigurationen $\omega \in \Omega \setminus \{\omega^-, \omega^+\}$ energiereicher sind, ω^+ und ω^- aber aus Symmetriegründen die gleiche Energie besitzen (wir vergleichen dabei jeweils auf endlichen Gebieten $\Lambda \in \mathcal{S}$). Es liegt also nahe anzunehmen, dass für große β zwei verschiedene extremale Gibbsmaße \mathbb{P}_β^\pm auf \mathbb{Z}^2 existieren, wobei $\lim_{\beta \nearrow \infty} \mathbb{P}_\beta^\pm = \mathbb{P}_\infty^\pm$ mit

$$\mathbb{P}_\infty^\pm(\{\omega\}) := \begin{cases} 1 & , \omega = \omega^+ \text{ oder } \omega = \omega^- \\ 0 & , \omega \in \Omega \setminus \{\omega^-, \omega^+\} \end{cases} .$$

Die beiden Wahrscheinlichkeitsmaße \mathbb{P}_∞^\pm sind also auf den Grundzustandskonfigurationen ω^+ bzw. ω^- konzentriert und beschreiben das Isingmodell bei Temperatur Null.

Wir wissen allerdings, dass eine entsprechende Aussage für das eindimensionale Isingmodell nicht gilt, denn dieses besitzt keinen Phasenübergang. Was ist also der Unterschied? Zunächst ist klar, dass für tiefe Temperaturen diejenigen Konfigurationen $\sigma \in E^\Lambda$ ein relativ großes Gewicht $\exp(-\beta H_\Lambda(\sigma))$ besitzen, bei denen nur wenige benachbarte Spins $\sigma_i, \sigma_k, \|i - k\|_1 = 1$ unterschiedlich orientiert sind.

Es ist daher ökonomischer, nur diese Spinpaare zu notieren. Wir betrachten der Einfachheit halber quadratische Gebiete $\Lambda \equiv \Lambda(a) = \{0, \dots, a-1\} \times$

$\{0, \dots, a - 1\} \subseteq \mathbb{Z}^2$ der Kantenlänge a und setzen außerhalb von Λ positive Randbedingungen voraus. Für $k = (k_1, k_2) \in \mathbb{Z}^2$ betrachten wir nun das Quadrat

$$Q_{(k_1, k_2)} := \{(x_1, x_2) \in \mathbb{R}^2 \mid |x_i - k_i| \leq \frac{1}{2}, i = 1, 2\} \quad (8.1)$$

mit Kantenlänge 1 um k . Den *Rand einer Konfiguration* $\omega = (\sigma, \tau) \in \Omega = E^\Lambda \times E^{\Lambda^c}$ mit positiven Randbedingungen $\tau_\ell = 1, \ell \in \Lambda^c$ setzen wir an als

$$\partial(\omega) := \partial \left(\bigcup_{k \in \mathbb{Z}^2: \omega_k = -1} Q_k \right) \subseteq \mathbb{R}^2 \quad (8.2)$$

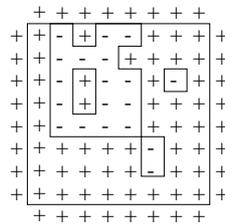


Abbildung 8.1: Kontur $\partial(\omega)$ von $\omega = (\sigma, \tau)$ für eine Konfiguration $\sigma \in \Lambda(8)$ mit positiven Randbedingungen τ

Es ist leicht zu sehen, dass von jedem Eckpunkt in

$$\mathbb{Z}_*^2 := \{(x_1, x_2) \in \mathbb{R}^2 \mid x_i - \frac{1}{2} \in \mathbb{Z}, i = 1, 2\}$$

eine gerade Zahl von Verbindungsstrecken zu nächsten Nachbarn in diesem verschobenen Gitter ausgehen. Wir müssen uns dazu nur überlegen, welche Spin-konfigurationen bei den der betrachteten Ecke benachbarten vier Spins $\omega_{(k_1, k_2)}$ mit $|k_i - x_i| = \frac{1}{2}$, vorkommen können, nämlich die in Abb. 8.2 dargestellten, und

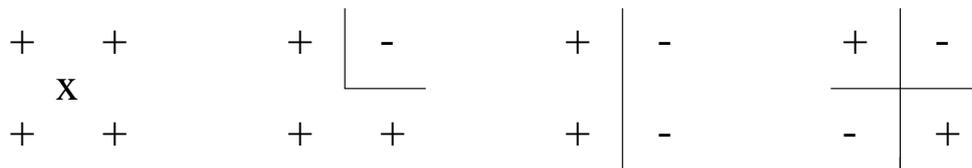


Abbildung 8.2: Konfigurationen der vier dem Punkt $x \in \mathbb{Z}_*^2$ benachbarten Spins, und deren Konturen

durch Symmetrieoperationen aus diesen hervorgehende.

Da andererseits $\partial(\omega)$ nur eine endliche Zahl von solchen Strecken enthält, können wir $\partial(\omega)$ in eindeutiger Weise als disjunkte Vereinigung von Konturen zerlegen, wobei wir unter *Konturen* selbstüberschneidungsfreie, geschlossene Streckenzüge verstehen. In Abb. 8.1 besteht $\partial(\omega)$ aus vier solchen Konturen. Konturen sollen auch als disjunkt angesehen werden, wenn sie gemeinsame Eckpunkte besitzen!

Bezeichnen wir mit $|\partial(\omega)|$ die Zahl der in $\partial(\omega)$ enthaltenen Verbindungsstrecken zwischen nächsten Nachbarn im *dualen Gitter* \mathbb{Z}_*^2 , so folgt

$$H_{\Lambda(a)}^{\tau}(\sigma) = 2|\partial(\omega)| - 2(a+1)a \quad \text{für } \omega = (\sigma, \tau).$$

Der Volumenterm $2(a+1)a$ ist unabhängig von der Konfiguration und beeinflusst daher das Gibbsmaß nicht. Die Gesamtlänge $|\partial(\omega)|$ des Randes der Konturen ist dagegen der entscheidende Term der Boltzmannfaktoren. Er wird mit der inversen Temperatur β multipliziert, sodass für tiefe Temperaturen lange Konturen sehr unwahrscheinlich sind.

Damit sollten aber auch (bei $+-$ Randbedingungen) große von Konturen umschlossene Gebiete mit (potentiell) negativen Spinausrichtungen unwahrscheinlich werden.

Es gilt für das Gibbsmaß $\mathbb{P}_{\beta}^{+}(a)$ auf $\Lambda(a)$ mit $+-$ Randbedingungen:

8.1 Lemma (Peierls-Ungleichung) Für jede Kontur γ ist

$$\mathbb{P}_{\beta}^{+}(a)(\{\omega \mid \gamma \subseteq \partial(\omega)\}) \leq \exp(-2\beta|\gamma|),$$

wobei $|\gamma|$ die Länge der Kontur bezeichnet.

Bew.: Da wir positive Randbedingungen vorausgesetzt haben, brauchen wir nur $\omega \in \Omega$ der Form $\omega = (\sigma, \tau)$ mit $\sigma \in E^{\Lambda(a)}$ und $\tau \in E^{\Lambda^c}$, $\tau_i \equiv 1$ betrachten. Wir bezeichnen mit Φ_{γ} die Menge der Konfigurationen, deren Rand die Kontur γ enthält, also

$$\Phi_{\gamma} := \{\sigma \in E^{\Lambda} \mid \gamma \subseteq \partial(\sigma, \tau)\}.$$

Die linke Seite der Peierls-Ungleichung ist

$$\begin{aligned} L := \mathbb{P}_{\beta}^{+}(a)(\{\omega \mid \gamma \subseteq \partial(\omega)\}) &= \frac{\sum_{\sigma \in \Phi_{\gamma}} \exp(-\beta H_{\Lambda}^{\tau}(\sigma))}{\sum_{\sigma \in E^{\Lambda}} \exp(-\beta H_{\Lambda}^{\tau}(\sigma))} \\ &= \frac{\sum_{\sigma \in \Phi_{\gamma}} \exp(-2\beta|\partial(\sigma, \tau)|)}{\sum_{\sigma \in E^{\Lambda}} \exp(-2\beta|\partial(\sigma, \tau)|)}. \end{aligned}$$

Nach dem Jordanschen Kurvensatz¹⁹ der Topologie besteht $\mathbb{R}^2 \setminus \gamma$ aus einem

¹⁹**Jordanscher Kurvensatz** Jeder Homöomorphismus $S^1 \rightarrow \gamma \subset \mathbb{R}^2$ zerlegt die Ebene in eine beschränkte und eine unbeschränkte Zusammenhangskomponente von $\mathbb{R}^2 \setminus \gamma$.

beschränktes Innengebiet und einem unbeschränkten Außengebiet. Sei nun

$$\Phi_\gamma^- := \{\sigma \in E^\Lambda \mid \gamma \cap \partial(\sigma, \tau) = \emptyset\}.$$

Die Bijektion

$$\chi_\gamma : \Phi_\gamma \rightarrow \Phi_\gamma^- \quad , \quad (\chi_\gamma(\sigma))_\ell = \begin{cases} \sigma_\ell & , \ell \text{ im Außengebiet} \\ -\sigma_\ell & , \ell \text{ im Innengebiet} \end{cases}$$

klappt alle Spins σ_ℓ von Gitterpunkten $\ell \in \mathbb{Z}^2$ im von der Kontur γ umschlossenen Innengebiet um. χ_γ entfernt damit die Kontur γ :

$$\partial(\sigma, \tau) = \partial(\chi_\gamma(\sigma), \tau) \dot{\cup} \gamma$$

und

$$|\partial(\sigma, \tau)| = |\partial(\chi_\gamma(\sigma), \tau)| + |\gamma|.$$

Damit ist

$$L = \frac{\sum_{\sigma \in \Phi_\gamma} \exp(-2\beta|\partial(\sigma, \tau)|)}{\sum_{\sigma \in E^\Lambda} \exp(-2\beta|\partial(\sigma, \tau)|)} \leq \frac{\sum_{\sigma \in \Phi_\gamma} \exp(-2\beta|\partial(\sigma, \tau)|)}{\sum_{\sigma \in \Phi_\gamma^-} \exp(-2\beta|\partial(\sigma, \tau)|)} = \exp(-2\beta|\gamma|),$$

was die Ungleichung beweist. □

Die Wahrscheinlichkeit des Auftretens langer Konturen vorgegebener Form sinkt also exponentiell mit deren Länge, unabhängig von der den thermodynamischen Limes regulierenden Kantenlänge a von $\Lambda(a)$.

Wir wollen diese Information dazu benutzen, auf die Wahrscheinlichkeit der Spinkonfigurationen mit $\sigma_i = -1$ für +-Randbedingungen zu schließen. Dazu bemerken wir, dass jeder solche Spin von mindestens einer Kontur umschlossen sein muss (wie in Abb. 8.3 dargestellt, können es auch mehrere sein):

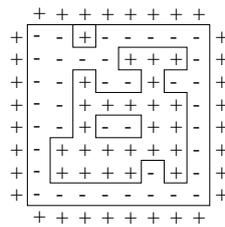


Abbildung 8.3: Ineinandergeschachtelte Konturen

8.2 Lemma Die Länge $|\gamma| \in \mathbb{N}$ einer Kontur ist gerade. Die Anzahl $A(l)$ der einen Punkt $i \in \mathbb{Z}^2$ umschließenden Konturen der Länge l ist

$$A(l) \leq \frac{l-2}{2} \cdot 3^{l-1}.$$

Bew.: Dass $|\gamma|$ gerade ist, sieht man beispielsweise durch folgende Beobachtung: Da die Kontur geschlossen ist, muss sowohl die Zahl der horizontalen als auch die Zahl der vertikalen Teilstücke gerade sein.

Zur Abschätzung von $A(l)$ überlegen wir uns zunächst, dass der von $i = (i_1, i_2)$ ausgehende Strahl $\{i + (\lambda, 0) \mid \lambda > 0\}$ γ mindestens einmal schneidet. Wir betrachten das (vertikale) Bond von γ mit dem größten λ -Wert. Dieses kann

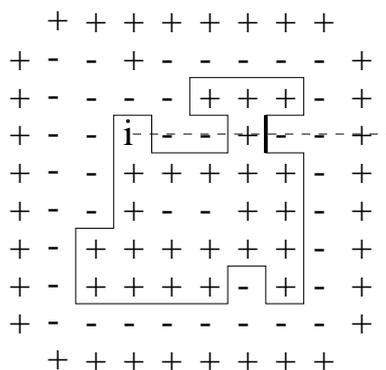


Abbildung 8.4: Kontur um den Punkt $i \in \mathbb{Z}^2$

nur λ -Werte der Form $-\frac{1}{2} + n$ mit $n \in \{1, \dots, \frac{l-2}{2}\}$ besitzen, wobei der größte vorkommende Wert für das Rechteck der Höhe 1 und Länge $\frac{l-2}{2}$ realisiert wird.

Jedes der $l - 1$ anderen Bonds kann bezüglich seines Vorgängers höchstens drei Richtungen einschlagen: links, geradeaus, rechts.

Durch Multiplikation der kombinatorischen Faktoren erhalten wir die Schranke für $A(l)$. \square

Die Zahl der $i \in \mathbb{Z}^2$ umschließenden Konturen wächst also exponentiell mit der Länge. Aus der Peierls-Ungleichung und dem obigen Lemma folgt durch Vergleich der Exponenten, dass für inverse Temperaturen $\beta > \frac{1}{2} \ln 3 \approx 0.55$ das Auftreten sehr langer, den Spin bei i umschließenden Konturen unwahrscheinlich ist.

Wir können sogar noch mehr sagen:

8.3 Satz Für $\beta > 0.7$ existieren zwei verschiedene Gibbsmaße $\mathbb{P}_\beta^+, \mathbb{P}_\beta^- \in \mathcal{G}(\beta J)$ für das Isingmodell auf \mathbb{Z}^2 , wobei für alle $\ell \in \mathbb{Z}^2$

$$\langle s_\ell \rangle_{\mathbb{P}_\beta^+} > 0 \quad \text{und} \quad \langle s_\ell \rangle_{\mathbb{P}_\beta^-} < 0.$$

8.4 Bemerkung Für tiefe Temperaturen tritt also spontane Magnetisierung auf. Aus der Lösung des zweidimensionalen Isingmodells ist bekannt, dass sogar schon für $\beta > \beta_{\text{cr}}$ mit der kritischen inversen Temperatur $\beta_{\text{cr}} = \frac{1}{2} \ln(1 + \sqrt{2}) \approx 0.44$ spontane Magnetisierung auftritt, siehe Kap. 10.

Bew.: Wir interessieren uns für

$$x := \mathbb{P}_\beta^+(a) \left(\{\omega \in \pi_{\Lambda(a)^c}^{-1}(\tau) \mid \sigma_i = -1\} \right)$$

und suchen β -Werte, für die diese Wahrscheinlichkeit kleiner als $\frac{1}{2} - \varepsilon$, ε unabhängig von $i \in \mathbb{Z}^2$ und a , bleibt.

Es gilt, unter Verwendung von Lemma 8.2, für $\beta > \frac{1}{2} \ln 3$

$$\begin{aligned} x &\leq \sum_{\substack{\text{Konturen } \gamma, \\ \text{die } i \text{ einschließen}}} \mathbb{P}_\beta^+(a)(\{\omega \mid \gamma \subseteq \partial(\omega)\}) \\ &\leq \sum_{l \in \mathbb{N}} A(l) \cdot \exp(-2\beta l) = \sum_{m \in \mathbb{N}} A(2m) \exp(-4\beta m) \\ &\leq \sum_{m \in \mathbb{N}} (m-1) 3^{2m-1} \cdot e^{-4\beta m} = \frac{1}{3} \sum_{m \in \mathbb{N}} (m-1) e^{-m\alpha} \\ &\hspace{15em} \text{mit } \alpha := 4(\beta - \frac{1}{2} \ln 3) \\ &= \frac{1}{3} e^{-\alpha} \cdot \sum_{n=0}^{\infty} n e^{-n\alpha} = \frac{1}{3} e^{-\alpha} \cdot \left(-\frac{\partial}{\partial \alpha} \sum_{n=0}^{\infty} e^{-n\alpha} \right) = \frac{1}{3} \frac{e^{-2\alpha}}{(1 - e^{-\alpha})^2} \\ &= \frac{1}{3} \frac{y^2}{(1-y)^2} \quad \text{mit } y := e^{-\alpha} \quad , \text{ also } y \in (0, 1). \end{aligned}$$

Dieser Ausdruck muss kleiner als $\frac{1}{2}$ sein, also $y < 3 - \sqrt{6}$ bzw. $\alpha > -\ln(3 - \sqrt{6})$.

Für $\beta = \frac{1}{4}\alpha + \frac{1}{2} \ln 3$ bedeutet das $\beta > \frac{1}{4} \ln(3(3 + \sqrt{6})) \approx 0.6986$.

Die Abschätzung ist unabhängig von der Kantenlänge a und dem Gitterplatz i des betrachteten Spins.

Wir können nun aus den Gibbsmaßen $\mathbb{P}_\beta^+(a)$ mit Randbedingungen τ auf $\Lambda(a)$ durch Translation Gibbsmaße mit Randbedingungen auf einem um Null zentrierten Gitter machen. Der Limes $a \rightarrow \infty$ liefert dann ein Gibbsmaß \mathbb{P}_β^+ auf \mathbb{Z}^2 und entsprechend \mathbb{P}_β^- wegen Symmetrie. \square

Es ist klar, dass unsere Abschätzungen relativ grob waren und mit mehr Aufwand verfeinert werden können. Das Ergebnis ist aber gar nicht so schlecht (0.7 statt 0.44 für die kritische inverse Temperatur). Ohnehin geht es uns weniger um das zweidimensionale Isingmodell, dessen freie Energiedichte wir explizit ausrechnen können und werden. Stattdessen werden wir überlegen, inwieweit sich das Peierls-Argument auch auf andere Systeme der Statistischen Mechanik anwenden lässt.

Der erste entscheidende Begriff ist der der Grundzustandskonfiguration.

8.5 Definition Sei $J : \mathcal{S}(d) \rightarrow \mathbb{R}$ ein translationsinvariantes Potential endlicher Reichweite auf \mathbb{Z}^d .

- Dann heißt $\omega \in \Omega = E^{\mathbb{Z}^d}$ **Grundzustandskonfiguration**, wenn für alle $\Lambda \in \mathcal{S}(d)$

$$H_\Lambda^\tau(\sigma') \geq H_\Lambda^\tau(\sigma) \quad \text{mit} \quad \omega = (\sigma, \tau) \in E^\Lambda \times E^{\Lambda^c} \quad \text{und} \quad \sigma' \in E^\Lambda \setminus \{\sigma\}.$$

- $\omega \in \Omega$ heißt **isolierte Grundzustandskonfiguration**, wenn für alle $\sigma' \neq \sigma$ die strikte Ungleichung $H_\Lambda^\tau(\sigma') > H_\Lambda^\tau(\sigma)$ gilt.

Mit anderen Worten, alle Konfigurationen der Form $\omega' = (\sigma', \tau) \in \Omega$, die sich von ω nur in endlich vielen Spinwerten unterscheiden, sollen eine höhere Energie als ω besitzen. Man beachte aber, dass nur die **Differenz**

$$H(\omega') - H(\omega) = \sum_{\substack{\Lambda' \in \mathcal{S} \\ \Lambda' \cap \Lambda \neq \emptyset}} J(\Lambda')(\omega_{\Lambda'} - \omega'_{\Lambda'})$$

der formalen Reihen $H(\omega) = - \sum_{\Lambda' \in \mathcal{S}} J(\Lambda')\omega_{\Lambda'}$ tatsächlich endlich ist.

8.6 Beispiel Isingmodell auf \mathbb{Z}^d mit ferromagnetischer Nächste-Nachbar-Wechselwirkung. Hier ist das Potential $J : \mathcal{S}(d) \rightarrow \mathbb{R}$ gleich

$$J(\Lambda) := \begin{cases} 1 & , \Lambda = \{i, k\} \text{ mit } \|i - k\|_1 = 1 \\ 0 & , \text{sonst.} \end{cases} \quad (8.3)$$

- Die Konfigurationen $\omega^\pm \in \Omega$ mit $\omega_\ell^+ = +1$, $\omega_\ell^- = -1$, $\ell \in \mathbb{Z}^d$ sind sicher Grundzustandskonfigurationen und sogar isoliert.
- Satz 8.3 lässt sich wörtlich auf den Fall $d \geq 2$ verallgemeinern. Ersetzt man nämlich die Quadrate in (8.1) durch d -dimensionale Würfel, dann ergeben sich analog zu (8.2) $(d-1)$ -dimensionale Konturen $\gamma \subseteq \mathbb{R}^d$, deren Energiebeitrag auf der rechten Seite der zu Lemma 8.1 analogen Peierls-Ungleichung gleich ihrem doppelten Flächeninhalt $|\gamma|$ ist.
- Auch die Abzählung aus Lemma 8.2 lässt sich übertragen. So zählt man in $d = 3$ Dimensionen die Konturen vorgegebener Fläche $|\gamma| = l$ ab, indem man alle Kanten in $\Lambda(a)$ nummeriert und jeweils an die erste Kante mit nur *einem* anliegenden Quadrat der aufzubauenden Kontur γ ein zweites Quadrat in einer der (höchstens) drei verbleibenden Ausrichtungen hinzufügt.
- Aber auch die Konfigurationen

$$\tilde{\omega}^{(k)} \in \Omega \quad , \quad \tilde{\omega}_\ell^{(k)} = \begin{cases} +1 & , \ell_k \geq 0 \\ -1 & , \ell_k < 0 \end{cases} \quad (k = 1, \dots, d)$$

sind ebenso wie die aus ihnen durch Translation oder Spinumklapp hervorgehenden Grundzustandskonfigurationen.

Für $d \geq 2$ ist $\tilde{\omega}^{(k)}$ isoliert, für $d = 1$ nicht. Die $\tilde{\omega}^{(k)}$ sind im Gegensatz zu ω^+ und ω^- nicht translationsinvariant.

Da bei niedrigen Temperaturen energiearme Konfigurationen von den Gibbsmaßen bevorzugt werden, ist es natürlich zu fragen, ob es für diese Temperaturen Gibbsmaße gibt, deren Abstand zu den auf den (isolierten) Grundzustandskonfigurationen klein ist. Dies kann, muss aber nicht der Fall sein.

- 8.7 Beispiel** 1. ω^\pm , $d = 1$. Wir wissen schon, dass das eindimensionale Isingmodell keinen Phasenübergang besitzt. Das Gibbsmaß ist also zu jeder Temperatur eindeutig und symmetrisch gegenüber Spinumklapp. Die ω^+ und ω^- können also keine Gibbsmaße tragen, erst recht nicht $\tilde{\omega}^{(1)}$.
2. Für $d = 2$ haben wir gerade die spontane Brechung der Spinumklappsymmetrie des Isingmodells bei tiefen Temperaturen gezeigt. Es stellt sich aber heraus, dass alle Gibbsmaße in $\mathcal{G}(\beta \cdot J)$ translationsinvariant sind.
3. Für $d \geq 3$ ist dies nicht mehr der Fall. Es gibt dann für große inverse Temperaturen β Gibbsmaße, deren Abstand zu dem auf $\tilde{\omega}^{(k)}$ konzentrierten δ -Maß klein ist. Es bildet sich also eine Grenzfläche zwischen zwei Halbräumen in \mathbb{Z}^d heraus, auf deren einer Seite die Spins überwiegend nach oben und auf deren anderer Seite die Spins überwiegend nach unten zeigen.

Der anschauliche Grund dafür ist, dass im Gegensatz zu $d = 2$ endliche Änderungen ω von $\tilde{\omega}^{(k)}$ zu einer Energieerhöhung führt, die mit für große Änderungen divergiert, siehe Abb. 8.5.

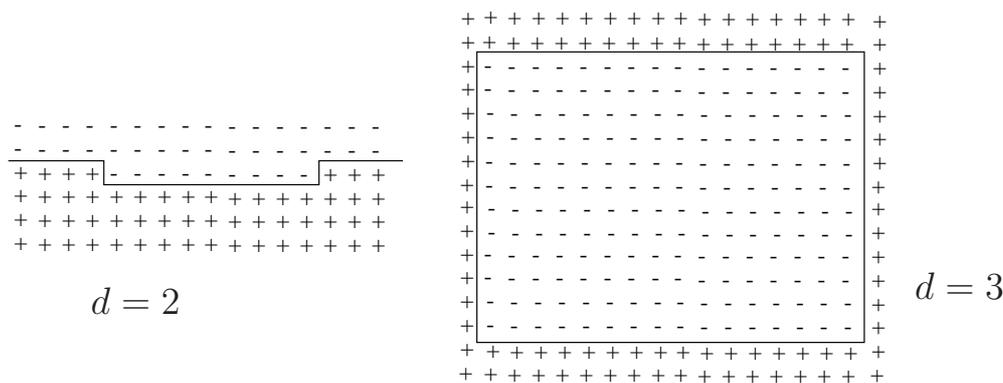


Abbildung 8.5: Änderung der Halbraumkonturen $\tilde{\omega}$. Vergrößerung der Grenzfläche um 2 in $d = 2$ bzw. um 56 in $d = 3$ Dimensionen

Neben dem Begriff der Grundzustandskonfiguration ist der Begriff der *Kontur* für das Peierls-Argument wesentlich. Entscheidend war für den Fall des Isingmodells die Peierls-Ungleichung, die den Energiezuwachs einer Konfiguration von unten durch die Länge der Kontur (multipliziert mit einer

Konstante) abgeschätzt hat. Konturen lassen sich verallgemeinernd als "Grenzflächen" auffassen, der Energiezuwachs kommt von einer "Oberflächenspannung" dieser Grenzflächen.

In Kapitel II des Buches [Sin] von SINAI kann man eine Diskussion der Peierls-Methode finden. In der aus ihr hervorgegangenen *Pirogov-Sinai-Theorie* kann man sogar auf Symmetrievoraussetzungen verzichten, siehe ZAHARADNIK [Za].

8.2 Korrelationsungleichungen

Im letzten Kapitel haben wir die Erwartungswerte $\langle \sigma_i \rangle$ von Spins dazu benutzt, um verschiedene Phasen voneinander zu unterscheiden. Jetzt wollen wir uns die allgemeine Frage stellen, wie wir Gibbsmaße durch Erwartungswerte von Observablen charakterisieren können.

Betrachten wir den Fall einer Menge S von Spins, zunächst für $|S| < \infty$. Der Konfigurationsraum ist also $\Omega = E^S$ und alle Funktionen sind stetig: $C(\Omega) = \{f : \Omega \rightarrow \mathbb{C}\}$. Der $2^{|S|}$ -dimensionale Vektorraum $C(\Omega)$ lässt als Basis die Funktionen der Form

$$s_\Lambda = \prod_{\ell \in \Lambda} s_\ell \quad (\Lambda \subseteq S)$$

zu (dabei sei das leere Produkt gleich 1 und $s_\ell(\omega) := \omega_\ell$). Auch das Gibbsmaß \mathbb{P} , $\mathbb{P}(\{\omega\}) := \frac{\exp(-H(\omega))}{\sum_{\omega' \in \Omega} \exp(-H(\omega'))}$ zur Energiefunktion $H : \Omega \rightarrow \mathbb{R}$ lässt sich in diesem Fall als Funktion auf Ω (mit Werten in $[0, 1]$) auffassen.

Die *Korrelationsfunktionen*, d. h. die Erwartungswerte

$$\langle s_\Lambda \rangle = \sum_{\omega \in \Omega} \mathbb{P}(\{\omega\}) \cdot s_\Lambda(\omega)$$

lassen sich, bis auf den fehlenden Normierungsfaktor $2^{-|S|}$, als die Fourierkoeffizienten dieser durch \mathbb{P} definierten Funktion interpretieren. Da \mathbb{P} ein Wahrscheinlichkeitsmaß ist, gilt natürlich $\langle s_\emptyset \rangle = 1$. Es gilt

$$\mathbb{P}(\{\omega\}) = 2^{-|S|} \sum_{\Lambda \subseteq S} \langle s_\Lambda \rangle \cdot s_\Lambda(\omega),$$

\mathbb{P} lässt sich also aus der Kenntnis der Korrelationsfunktionen rekonstruieren.

Ist nun S eine unendliche Menge, z. B. $S = \mathbb{Z}^d$, so ist es im Allgemeinen am praktischsten, ein Gibbsmaß durch seine Korrelationsfunktionen zu beschreiben (diese werden dann natürlich nicht durch Summation über die überzählbar vielen Elementarereignisse $\omega \in \Omega$, sondern über die beiden Ereignisse $s_\Lambda^{-1}(\pm 1)$ definiert).

Ist die betrachtete Menge Λ n -elementig, so spricht man bei $\langle s_\Lambda \rangle$ auch von einer n -Punkt-Korrelation. Besonders wichtig sind die Zwei-Punkt-Korrelationen $\langle s_i \cdot s_j \rangle$, $i, j \in S$.

8.8 Beispiel (Ising-Spinkette) Wir haben in Kapitel 6.5 die Freie Energie $F(\beta)$ der Ising-Spinkette mit "freien Randbedingungen" errechnet.

Jetzt wollen wir die periodische Ising-Spinkette mit $S := \mathbb{Z}/N\mathbb{Z}$, $\Omega_N := E^S$ betrachten. Die Energiefunktion $H_N : \Omega_N \rightarrow \mathbb{R}$ hat hier die Form

$$H_N(\omega) := -J \sum_{i=0}^{N-1} \omega_i \omega_{i+1} - h \sum_{i=0}^{N-1} \omega_i,$$

wobei $\omega_N = \omega_0$. Damit ist die Zustandssumme

$$Z_N(\beta) = \sum_{\omega \in \Omega_N} e^{-\beta H_N(\omega)} = \text{tr}(A^N)$$

mit der aus Kapitel 6.5 bekannten Transfermatrix $A = \begin{pmatrix} e^{J'+h'} & e^{-J'+h'} \\ e^{-J'-h'} & e^{J'-h'} \end{pmatrix}$, und den Abkürzungen $J' = \beta J$, $h' = \beta h$. Die Matrix W diagonalisiere A , d. h.

$$WAW^{-1} = \begin{pmatrix} \lambda_I & 0 \\ 0 & \lambda_{II} \end{pmatrix}$$

mit den Eigenwerten

$$\lambda_{I/II} = e^{J'} \left(\cosh(h') \pm \sqrt{\cosh^2(h') - (1 - e^{-4J'})} \right).$$

Damit ist

$$Z_N(\beta) = \text{tr}((WAW^{-1})^N) = \text{tr} \begin{pmatrix} \lambda_I^N & 0 \\ 0 & \lambda_{II}^N \end{pmatrix} = \lambda_I^N \left(1 + (\lambda_{II}/\lambda_I)^N \right).$$

Da $|\lambda_{II}| < \lambda_I$, ist im Limes $N \rightarrow \infty$ die Zustandssumme $Z_N(\beta) \sim \lambda_I^N$.

Es sollen jetzt die Zwei-Punkt-Korrelationen für den Spezialfall $h = 0$ berechnet werden. In diesem Fall ist $\lambda_I = 2 \cosh J'$, $\lambda_{II} = 2 \sinh J'$ und als diagonalisierende Matrix W können wir die orthogonale Matrix $W := \sqrt{\frac{1}{2}} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{pmatrix}$ wählen, sodass $W^{-1} = W$.

Nun ist für $0 \leq i < j < N$ und $n := j - i$

$$\begin{aligned} \langle s_i \cdot s_j \rangle_N &= \frac{1}{Z_N(\beta)} \sum_{\omega \in \Omega} \omega_i \cdot \omega_j \cdot e^{-\beta H_N(\omega)} \\ &= \frac{1}{Z_N(\beta)} \text{tr}(A^{i-1} S A^{j-i} S A^{N-j+1}) \\ &= \frac{1}{Z_N(\beta)} \text{tr}(S A^n S A^{N-n}) = \langle s_0 \cdot s_n \rangle_N \end{aligned}$$

mit $S := \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$. Da $W^{-1}SW = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$, ist

$$\begin{aligned} \langle s_i \cdot s_j \rangle_N &= \frac{\text{tr} \left(W^{-1}SW(W^{-1}AW)^n W^{-1}SW(W^{-1}AW)^{N-n} \right)}{Z_N(\beta)} \\ &= \frac{\text{tr} \left(\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \lambda_I^n & 0 \\ 0 & \lambda_{II}^n \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \lambda_I^{N-n} & 0 \\ 0 & \lambda_{II}^{N-n} \end{pmatrix} \right)}{Z_N(\beta)} \\ &= \frac{\text{tr} \left(\begin{pmatrix} \lambda_{II}^n & 0 \\ 0 & \lambda_I^n \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \lambda_I^{N-n} & 0 \\ 0 & \lambda_{II}^{N-n} \end{pmatrix} \right)}{Z_N(\beta)} \\ &= \frac{\lambda_I^{N-n} \lambda_{II}^n + \lambda_{II}^{N-n} \lambda_I^n}{\lambda_I^N + \lambda_{II}^N}. \end{aligned}$$

Damit ist

$$\begin{aligned} \langle s_i \cdot s_j \rangle &:= \lim_{N \rightarrow \infty} \langle s_i \cdot s_j \rangle_N = \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{\frac{\lambda_{II}^n}{\lambda_I^n} + \left(\frac{\lambda_{II}}{\lambda_I} \right)^N \frac{\lambda_I^n}{\lambda_{II}^n}}{1 + \left(\frac{\lambda_{II}}{\lambda_I} \right)^N} \\ &= (\lambda_{II}/\lambda_I)^n = (\tanh J')^n. \end{aligned}$$

Führt man allgemein die *Korrelationslänge* L bei Spinketten als

$$L^{-1} := \lim_{n \rightarrow \infty} \frac{1}{n} |\ln \langle s_i s_{i+n} \rangle|$$

ein (soweit der Limes existiert und i -unabhängig ist), so ergibt sich in unserem Fall

$$L = 1/\ln(\coth(\beta J)) \quad \text{und} \quad \langle s_i \cdot s_j \rangle = e^{-|i-j|/L}. \quad (8.4)$$

Die Zwei-Punkt-Korrelationen der Ising-Spinkette ohne äußeres Magnetfeld fallen also im Abstand exponentiell ab, wobei die Korrelationslänge für Temperatur $T \searrow 0$ divergiert.

Wenn wir für die (periodische) Ising-Spinkette nach der gleichen Methode die Korrelationsfunktion $\langle s_\Lambda \rangle$ für $h = 0$ ausrechnen, stellen wir fest, dass $\langle s_\Lambda \rangle \geq 0$ gilt, unabhängig von $\Lambda \in \mathcal{S}$. Würden wir die h -Abhängigkeit einbeziehen (was für die Zwei-Punkt-Funktionen als Übungsaufgabe zu berechnen ist), würden wir feststellen, dass die $\langle s_\Lambda \rangle$ in h monoton wachsen. Ist dies ein Zufall oder nicht? Darüber gibt der folgende Satz von Griffiths, Kelly und Sherman Auskunft:

8.9 Satz (GKS-Ungleichungen) Sei $|S| < \infty$, $\Omega = E^S$ und die Energiefunktion $H : \Omega \rightarrow \mathbb{R}$ sei ferromagnetisch, d. h.

$$H(\omega) = - \sum_{\Lambda \subseteq S} J(\Lambda) \omega_\Lambda \quad \text{mit} \quad J(\Lambda) \geq 0.$$

Dann gilt für $A, B \subseteq S$

$$1. \quad \langle s_A \rangle \geq 0$$

$$2. \quad \frac{\partial \langle s_A \rangle}{\partial J(B)} \equiv \langle s_A s_B \rangle - \langle s_A \rangle \cdot \langle s_B \rangle \geq 0$$

Bew.: 1.) Wir verwenden die Potenzreihendarstellung der Exponentialfunktion:

$$\begin{aligned} \langle s_A \rangle &= \frac{1}{Z} \sum_{\omega \in \Omega} \omega_A \exp(-H(\omega)) = \frac{1}{Z} \sum_{\omega \in \Omega} \omega_A \exp\left(\sum_{\Lambda \subseteq S} J(\Lambda) \omega_\Lambda\right) \\ &= \frac{1}{Z} \sum_{\omega \in \Omega} \sum_{n=0}^{\infty} \omega_A \frac{(\sum_{\Lambda \subseteq S} J(\Lambda) \omega_\Lambda)^n}{n!} \\ &= \frac{1}{Z} \sum_{n=0}^{\infty} \sum_{\Lambda_1, \dots, \Lambda_n \subseteq S} \frac{J(\Lambda_1) \cdot \dots \cdot J(\Lambda_n)}{n!} \sum_{\omega \in \Omega} \omega_A \omega_{\Lambda_1} \cdot \dots \cdot \omega_{\Lambda_n} \end{aligned}$$

Wegen $\omega_A \omega_{\Lambda_1} \cdot \dots \cdot \omega_{\Lambda_n} = \omega_{\Lambda'}$ mit $\Lambda' := A \Delta \Lambda_1 \Delta \dots \Delta \Lambda_n$ sind die Summanden von der Form

$$C \cdot \sum_{\omega \in \Omega} \omega_{\Lambda'} = \begin{cases} C \cdot 2^{|S|} & , \Lambda' = \emptyset \\ 0 & , \text{sonst} \end{cases}$$

mit $C := J(\Lambda_1) \cdot \dots \cdot J(\Lambda_n)/n! \geq 0$.

2.) Mit $C := A \Delta B$ gilt

$$\begin{aligned} &Z^2 \cdot (\langle s_A s_B \rangle - \langle s_A \rangle \langle s_B \rangle) \\ &= \sum_{\omega^I, \omega^{II} \in \Omega} (\omega_C^I - \omega_A^I \cdot \omega_B^{II}) \cdot \exp\left(\sum_{\Lambda \subseteq S} J(\Lambda) \cdot (\omega_\Lambda^I + \omega_\Lambda^{II})\right) \\ &= \sum_{\omega^I, \omega^{III} \in \Omega} \omega_C^I (1 - \omega_B^{III}) \exp\left(\sum_{\Lambda \subseteq S} J(\Lambda) \omega_\Lambda^I (1 + \omega_\Lambda^{III})\right) \\ &\quad \text{mit } \omega^{III} := \omega^I \cdot \omega^{II} \\ &= \sum_{\omega^{III} \in \Omega} \underbrace{(1 - \omega_B^{III})}_{\geq 0} \underbrace{\left(\sum_{\omega^I \in \Omega} \omega_C^I \cdot \exp\left(\sum_{\Lambda \subseteq S} \underbrace{[J(\Lambda) \cdot (1 + \omega_\Lambda^{III})]}_{\geq 0} \cdot \omega_\Lambda^I\right) \right)}_{\geq 0} \\ &\geq 0 \quad \text{wegen Teil 1. des Satzes 8.9} \quad \square \end{aligned}$$

Diese Ungleichungen besagen also, dass bei ferromagnetischer Wechselwirkung die Spins die Tendenz besitzen, sich in gleicher Richtung zu orientieren und

zwar umso stärker, je stärker diese Wechselwirkung ist. Damit sind ferromagnetische Wechselwirkungen besser verstanden als solche, bei denen $J(\Lambda)$ auch kleiner als Null sein kann, also Kräfte in entgegengesetzte Richtungen wirken können.

Wir können die GKS-Ungleichungen dazu benutzen, um etwas über die Abhängigkeit gewisser Erwartungswerte von Parametern zu erfahren.

8.10 Beispiel Die mittlere Magnetisierung $M = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \langle s_i \rangle$ eines ferromagnetischen Systems von N Spins nimmt monoton mit der Temperatur ab.

Bew.: Übung

Wir können aber auch verschiedene Modelle der Statistischen Mechanik miteinander vergleichen.

8.11 Beispiel Es ist bekannt, dass das ferromagnetische Isingmodell auf \mathbb{Z}^2 mit

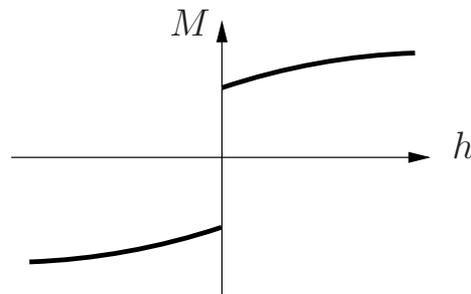


Abbildung 8.6: Mittlere Magnetisierung M des zweidimensionalen Isingmodells als Funktion des äußeren Magnetfeldes h

äußeren Magnetfeld h qualitativ die in Abb. 8.6 dargestellte Abhängigkeit des Erwartungswertes

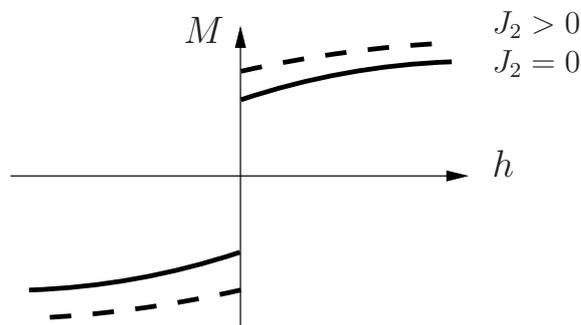
$$m := \lim_{\Lambda \rightarrow \infty} \frac{1}{|\Lambda|} \left\langle \sum_{i \in \Lambda} s_i \right\rangle$$

der mittleren Magnetisierung zeigt, wenn die Temperatur $T < T_{\text{cr}}$ ist.

Addieren wir nun ferromagnetische Wechselwirkungen zwischen übernächsten Nachbarn, d. h.

$$J(\Lambda) = \begin{cases} h & , \Lambda = \{i\} \\ J_1 & , \Lambda = \{i, k\}, \|i - k\|_2 = 1 \\ J_2 & , \Lambda = \{i, k\}, \|i - k\|_2 = \sqrt{2} \\ 0 & \text{sonst} \end{cases}$$

mit $J_2 > 0$, so vergrößert sich damit die Magnetisierung für positive h (aus Symmetriegründen gilt $m(-h) = -m(h)$):



Wir können auch die Existenz des thermodynamischen Limes von Korrelationsfunktionen ferromagnetischer Systeme mit freien Randbedingungen zeigen (siehe Übung).

Dass Korrelationsfunktionen überhaupt einen thermodynamischen Limes besitzen, ist keineswegs trivial und nicht so allgemein zu beweisen wie der Limes der Freien Energie. Im Allgemeinen wird der thermodynamische Limes der Korrelationsfunktionen auch von der Wahl der Randbedingungen abhängen.

8.3 3-D Isingmodell: Nicht translationsinvariante Phasen

Für $d \geq 2$ besitzt das d -dimensionale Isingmodell bei niedrigen Temperaturen eine von Null verschiedene *spontane Magnetisierung*, d. h. es existieren zwei translationsinvariante Gibbsmaße \mathbb{P}_β^\pm mit Erwartungswerten $\langle s_l \rangle_{\mathbb{P}_\beta^+} > 0$ bzw. $\langle s_l \rangle_{\mathbb{P}_\beta^-} < 0$ der mittleren Magnetisierung (Satz 8.3).

Dies ist ein Beispiel für das Phänomen der *spontanen Symmetriebrechung*, bei dem die Phasen (extremale Gibbsmaße) weniger Symmetrien besitzen als das Potential J , mit dessen Hilfe sie definiert sind. Dabei verstehen wir unter einer *Symmetrie* des Meßraumes (Ω, \mathcal{F}) eine Bijektion

$$B : \Omega \rightarrow \Omega \quad \text{mit} \quad B^{-1}(A) \in \mathcal{F} \quad (A \in \mathcal{F}).$$

Das Potential J bzw. das Gibbsmaß \mathbb{P} besitzt die *Symmetrie* B , falls $J \circ B = J$ bzw. $B(\mathbb{P}) = \mathbb{P}$ gilt. Für jede Symmetrie des Potentials ist zwar mit $\mathbb{P} \in \mathcal{G}(J)$ auch $B(\mathbb{P}) \in \mathcal{G}(J)$, aber diese Gibbsmaße können voneinander verschieden sein.

Während im Fall des zweidimensionalen Isingmodells die gebrochene Symmetrie die *Spinumklappsymmetrie*

$$I : \Omega \rightarrow \Omega \quad , \quad I(\omega)_l := -\omega_l \quad (l \in \mathbb{Z}^d)$$

war, blieb die *Translationssymmetrie*

$$T_k : \Omega \rightarrow \Omega \quad , \quad T_k(\omega)_l := \omega_{l-k} \quad (l \in \mathbb{Z}^d)$$

für Verschiebungen um $k \in \mathbb{Z}^d$ ungebrochen.

Im Fall des dreidimensionalen Isingmodells werden wir nun sehen, dass auch diese Symmetrie gebrochen sein kann. Der folgende, von VAN BEIJEREN [Be] stammende Satz setzt dieses in Bezug zum zweidimensionalen Isingmodell.

Es sei also wie in (8.3) die Stärke der Paarwechselwirkung gleich Eins, und $\beta_{\text{cr}}^{(2)}$ die inverse kritische Temperatur des zweidimensionalen Isingmodells, oberhalb derer die spontane Magnetisierung $m^{(2)}(\beta) = \langle s_l \rangle_{\mathbb{P}_\beta^+}$ strikt positiv ist.

8.12 Satz Für alle inversen Temperaturen $\beta > \beta_{\text{cr}}^{(2)}$ besitzt das dreidimensionale Isingmodell ein extremales Gibbsmaß $\mathbb{P}^{(3)}(\beta)$, für das

$$\langle s_l \rangle_{\mathbb{P}^{(3)}(\beta)} \geq m^{(2)}(\beta) \quad (l = (l_1, l_2, l_3) \in \mathbb{Z}^3 \text{ mit } l_3 \geq 0)$$

und

$$\langle s_l \rangle_{\mathbb{P}^{(3)}(\beta)} \leq -m^{(2)}(\beta) \quad (l = (l_1, l_2, l_3) \in \mathbb{Z}^3 \text{ mit } l_3 < 0).$$

8.13 Bemerkung $\mathbb{P}^{(3)}(\beta)$ ist also nicht translationsinvariant unter Verschiebungen in der 3-Richtung, wohl aber unter Verschiebungen in den 1- und 2-Richtungen. Der Erwartungswert $\langle s_l \rangle_{\mathbb{P}^{(3)}(\beta)}$ wächst monoton in $l_3 \in \mathbb{Z}$.

Bew.: Die Beweisstrategie besteht darin, die Spins in einer Ebene mit konstantem Wert von l_3 mit den Spins des zweidimensionalen Isingmodells zu vergleichen, und die GKS-Ungleichungen anzuwenden. Es sei dazu für $n \in \mathbb{N}$

$$\begin{aligned} \Lambda^{(d)} &:= \{-n, \dots, n\}^d \subseteq \mathbb{Z}^d, \\ \Omega^{(d)} &:= E^{\Lambda^{(d)}} \quad (\text{mit } E = \{-1, 1\}), \end{aligned}$$

und

$$H^{(d)} : \Omega^{(d)} \rightarrow \mathbb{R}, \quad H^{(d)}(\omega) := - \sum_{\{i,k\} \subseteq \Lambda^{(d)}}^* \omega_i \omega_k - \sum_{i \in \Lambda^{(d)}} h_i \omega_i \quad (8.5)$$

die Energiefunktionen, wobei das Symbol \sum^* Summation nur über nächste Nachbarn bezeichnet. Dabei dienen die Terme $h_i \omega_i$ dazu, die Randbedingungen zu fixieren:

- Für $d = 2$ soll $h_l = 0$ sein, außer für die Randspins mit $d(l, \mathbb{Z}^d - \Lambda^{(d)}) = 1$.
Deren

$$N(l) := |\{k \in \mathbb{Z}^d - \Lambda^{(d)} \mid d(l, k) = 1\}|$$

Nachbarspins aus $\mathbb{Z}^d - \Lambda^{(d)}$ sollen gleich $+1$ sein, sodass $h_l := N(l)$ gilt.

- Für $d = 3$ soll

$$h_l := \begin{cases} N(l) & , 0 \leq l_3 \leq n \\ -N(l) & , -n \leq l_3 \leq -1 \end{cases}$$

gelten, entsprechend Randbedingungen, die für $l_3 \geq 0$ positiv und für $l_3 < 0$ negativ sind.

Wir setzen nun

$$\Lambda_0 := \{l \in \Lambda^{(3)} \mid l_3 = 0\} \quad , \quad \Lambda_{>} := \{l \in \Lambda^{(3)} \mid l_3 > 0\} \quad \text{und} \quad \Lambda_{\geq} := \Lambda_{>} \cup \Lambda_0.$$

Damit ist

$$\begin{aligned} H^{(3)}(\omega) = & \\ & - \left[\frac{1}{2} \sum_{i,k \in \Lambda_{>}}^* (\omega_i \omega_k + \omega_{-i} \omega_{-k}) + \frac{1}{2} \sum_{i,k \in \Lambda_0}^* \omega_i \omega_k + \sum_{i \in \Lambda_{>}, k \in \Lambda_0}^* (\omega_i + \omega_{-i}) \omega_k \right] \\ & - \sum_{i \in \Lambda_{>}} h_i (\omega_i - \omega_{-i}) - \sum_{i \in \Lambda_0} h_i \omega_i. \end{aligned}$$

Da wir am Vergleich der Isingmodelle in Dimension 2 und 3 interessiert sind, betrachten wir jetzt auf dem Produktraum die Energiefunktion

$$H : \Omega^{(2)} \times \Omega^{(3)} \rightarrow \mathbb{R} \quad , \quad H(\sigma, \omega) := H^{(2)}(\sigma) + H^{(3)}(\omega).$$

Das Gibbsmaß von H ist das Produkt der Gibbsmaße von $H^{(2)}$ und $H^{(3)}$, denn es tauchen keine in σ und ω gemischten Glieder in $H(\sigma, \omega)$ auf.

Setzen wir nun

$$s_i := \frac{1}{2}(\omega_i + \omega_{-i}) \quad , \quad d_i := \frac{1}{2}(\omega_i - \omega_{-i}) \quad (i \in \Lambda_{>})$$

und

$$s_i := \frac{1}{2}(\omega_i + \sigma_i) \quad , \quad d_i := \frac{1}{2}(\omega_i - \sigma_i) \quad (i \in \Lambda_0),$$

(mit $\sigma_i := \sigma_{(i_1, i_2)}$ für $i = (i_1, i_2, 0) \in \Lambda_0$), dann ist

$$\begin{aligned} H(\sigma, \omega) = & - \left[\sum_{i,k \in \Lambda_{>}}^* (s_i s_k + d_i d_k) + \sum_{i,k \in \Lambda_0}^* (s_i s_k + d_i d_k) \right. \\ & \left. + 2 \sum_{i \in \Lambda_{>}, k \in \Lambda_0}^* s_i (s_k + d_k) \right] - 2 \sum_{i \in \Lambda_{>}} h_i d_i - 2 \sum_{i \in \Lambda_0} h_i s_i. \quad (8.6) \end{aligned}$$

Wir wollen nun über die s_i und d_i statt die σ_i und ω_i summieren. Allerdings ist $d_i = 0$ für $s_i \neq 0$ und umgekehrt. Wir setzen daher mit $E_3 := \{-1, 0, 1\}$

$$\Omega := \left\{ (s, d) \in E_3^{\Lambda_{\geq}} \times E_3^{\Lambda_{\geq}} \mid s_i = 0 \iff d_i \neq 0 \right\}.$$

Notieren wir nur die von Null verschiedenen Spinwerte, dann ist

$$\Omega \cong \dot{\bigcup}_{A \subseteq \Lambda_{\geq}} \Omega_A \quad \text{mit} \quad \Omega_A := E^{(\Lambda_{\geq} - A)} \times E^A.$$

Wir wollen nun zeigen, dass die (bez. H auf Ω definierten) Erwartungswerte

$$\langle d_l \rangle_{\beta H} \geq 0 \quad (l \in \Lambda_0)$$

erfüllen, denn dies bedeutet, dass

$$\langle \omega_l \rangle_{\beta H^{(3)}} \geq \langle \omega_l \rangle_{\beta H^{(2)}} \quad (l \in \Lambda_0) \quad (8.7)$$

gilt, die Spins in der Grenzschicht Λ_0 also stärker nach oben gerichtet sind als die des zweidimensionalen Isingmodells mit $+-$ Randbedingungen.

Dazu schreiben wir bezüglich des Gibbsmaßes $\mathbb{P}_{\beta H}$ von βH

$$\langle d_l \rangle_{\beta H} = \sum_{A \subseteq \Lambda_{\geq} : l \in A} \mathbb{P}_{\beta H}(\Omega_A) \cdot \langle d_l \rangle_{\beta H_A}, \quad (8.8)$$

wobei $H_A : \Omega_A \rightarrow \mathbb{R}$ durch Restriktion von (8.6) auf Ω_A gegeben ist. Die Wechselwirkung von H_A ist aber ferromagnetisch, sodass (8.7) aus der ersten GKS-Ungleichung folgt.

$H^{(3)}$ hat eine eingebaute Asymmetrie, denn die Randbedingungen sind in den $n+1$ Schichten mit $l_3 \in \{0, \dots, n\}$ positiv, während sie in den n Schichten $l_3 \in \{-n, \dots, -1\}$ negativ sind. Man könnte also meinen, dass die Ungleichung (8.7) dieser Asymmetrie geschuldet ist. Dies ist aber nicht der Fall. Wir betrachten dazu die Energiefunktion $H_{\lambda}^{(3)} : \Omega^{(3)} \rightarrow \mathbb{R}$ mit Parameter $\lambda \in \mathbb{R}$, die die gleiche Form (8.5) wie $H^{(3)}$ besitzt, wobei aber die Randbedingungen redefiniert werden:

$$h_l := \begin{cases} N(l) + \lambda & , \quad l_3 = n \\ N(l) & , \quad 0 \leq l_3 \leq n-1 \\ -N(l) & , \quad -n \leq l_3 \leq -1. \end{cases}$$

Es ist also $H_0^{(3)} = H^{(3)}$, während im Limes $\lambda \rightarrow \infty$ mit

$$\langle \omega_l \rangle_{\infty} := \lim_{\lambda \rightarrow \infty} \langle \omega_l \rangle_{\lambda}$$

die Spins in der obersten Schicht Erwartungswert

$$\langle \omega_l \rangle_{\infty} = 1 \quad (l_3 = n)$$

besitzen. Weiter gilt

$$\langle \omega_{(l_1, l_2, -1-l_3)} \rangle_{\infty} = - \langle \omega_{(l_1, l_2, l_3)} \rangle_{\infty}$$

für alle $(l_1, l_2, l_3) \in \{-n, \dots, n\} \times \{-n, \dots, n\} \times \{-n+1, \dots, n-1\}$. Andererseits ist nach der zweiten GKS-Ungleichung

$$\frac{d}{d\lambda} \langle \omega_l \rangle_\lambda \geq 0,$$

sodass insbesondere für die nullte Schicht gilt

$$\langle \omega_l \rangle_\infty \geq \langle \omega_l \rangle_{\beta H^{(2)}} \quad (l \in \Lambda_0).$$

Da für $\beta > \beta_{\text{cr}}^{(2)}$ die rechte Seite dieser Ungleichung im Limes $n \rightarrow \infty$ gegen $m^{(2)}(\beta) > 0$ konvergiert, ist die Behauptung bewiesen. \square

Durch Anwendung der Translations- und Spinumklappsymmetrie sowie der durch Permutation der Koordinaten (l_1, l_2, l_3) von $l \in \mathbb{Z}^3$ entstehenden Symmetrien auf $\mathbb{P}^{(3)}(\beta)$ erhalten wir so für das dreidimensionale Isingmodell abzählbar unendlich viele reine, nicht translationsinvariante Phasen. Es gilt also $|\text{Ex}(\mathcal{G}(\beta J))| = \infty$.

9 Abwesenheit von Phasenübergängen

9.1 Analytizität der Freien Energie	112
9.2 Eindeutiges Gibbsmaß bei hohen Temperaturen	122
9.3 Die Hochtemperaturentwicklung	126

Wir haben zwei Aspekte von Phasenübergängen kennen gelernt. Zum einen kann man sich fragen, ob für feste Parameter (Temperatur, äußeres Magnetfeld, ...) mehr als ein Gibbsmaß in $\mathcal{G}(J)$ existiert. Zum anderen kann man untersuchen, ob die Dichte der Freien Energie reell-analytisch von den Parametern abhängt oder nicht.

In Bezug auf die erste Frage wird man erwarten, dass für Potentiale J kleiner Norm die Menge $\mathcal{G}(J)$ der Gibbsmäße auf $\Omega = E^{\mathbb{Z}^d}$ einelementig ist, denn $\mathcal{G}(0)$ besteht ja nur aus dem Produktmaß $\otimes_{\ell \in \mathbb{Z}^d} \mu$ des Laplace-Wahrscheinlichkeitsmaßes μ auf E (siehe Bem. 7.14). Das kann man tatsächlich durch ein Kontraktionsargument auf dem Raum $M(\Omega)$ der Wahrscheinlichkeitsmaße zeigen. Insbesondere folgt daraus, dass für hohe Temperaturen nur ein Gibbsmaß existiert, denn man betrachtet ja dann die Familie $\mathcal{G}(\beta J)$ für kleine $\beta > 0$.

Man erfährt auf diese Weise auch, dass dieses eindeutige Gibbsmaß beinahe ein Produktmaß ist, dass die Spins auf dem Gitter also nur schwach korreliert sind.

9.1 Analytizität der Freien Energie

In diesem Kapitel soll zunächst die zweite Frage nach der reell-analytischen Abhängigkeit der Freien Energie von den Parametern untersucht werden und zwar für Isingmodelle.

Die Zustandssumme hängt also in diesem Fall von der inversen Temperatur β und dem äußeren Magnetfeld parametrisch ab. Für endliche Gitterbereiche Λ ist die Zustandssumme Z_Λ reell-analytisch in diesen Parametern. Die einzige Möglichkeit für eine Nichtanalytizität der Freien Energie F_Λ (die ja bis auf Normierung der Logarithmus von Z_Λ ist), besteht im Auftreten von Nullstellen von Z_Λ . Für reelle Parameter h ist aber (nach Voraussetzung) die Energiefunktion reell und damit für $\beta \in \mathbb{R}$ die Zustandssumme positiv, sodass Phasenübergänge für solche endlichen Systeme nicht auftreten können.

Nun können sich aber im thermodynamischen Limes großer Λ Nullstellen vom Komplexen aus an reelle Parameterwerte heranmachen und für einen Phasenübergang des Limesystems sorgen, siehe etwa Beispiel 7.6.

Um umgekehrt auszuschließen, dass an einem Punkt $p \in \mathbb{R}^n$ des Parameter-raums das unendliche System einen Phasenübergang besitzt, reicht es typischerweise aus, eine Λ -unabhängige Umgebung $U \subseteq \mathbb{C}^n$ von p zu finden, in der keine Nullstellen der endlichen Zustandssummen Z_Λ liegen. Dann ist auch $(Z_\Lambda)^{1/|\Lambda|}$ in U analytisch. Kann man zusätzlich noch gleichmäßige Konvergenz dieser Funktionenfolge auf Kompakta im komplexifizierten Parameterraum zeigen, so folgt nach dem Satz von Weierstraß, dass auch die Grenzfunktion auf U analytisch ist. Wegen des später zu behandelnden Satzes von Hurwitz ist die Grenzfunktion dann ebenfalls nullstellenfrei, sodass auch die Dichte der Freien Energie eine reell-analytische Funktion ist.

Entscheidend ist also die Existenz des nullstellenfreien Gebietes U . Der Kreisatz von Lee und Yang (und seine Verallgemeinerungen durch Ruelle und andere) ermöglichen für Isingmodelle die Überprüfung dieser Bedingung.

Wir können allgemein annehmen, dass $J : \mathcal{S}(d) \rightarrow \mathbb{R}$ ein translationsinvariantes, ferromagnetisches Paarpotential endlicher Reichweite R auf \mathbb{Z}^d ist (wir müssen uns also nicht auf Wechselwirkungen zwischen nächsten Nachbarn beschränken). Für $\Lambda \in \mathcal{S}(d)$ hat damit die Zustandssumme Z_Λ die Form

$$Z_\Lambda(\beta) = \sum_{\sigma \in E^\Lambda} \exp(-\beta H_\Lambda(\sigma))$$

mit Energiefunktion

$$H_\Lambda : E^\Lambda \rightarrow \mathbb{R} \quad , \quad H_\Lambda(\sigma) := -\frac{1}{2} \sum_{i \neq k \in \Lambda} j(i-k) \sigma_i \sigma_k - \sum_{i \in \Lambda} h_i \sigma_i \quad (9.1)$$

und $j(\ell) \geq 0$, $j(\ell) = 0$ für $\|\ell\| > R$. Wir werden den translationsinvarianten ferromagnetischen Fall $h_i \equiv h$ für $h > 0$ untersuchen. Bei dieser Analyse ist es aber hilfreich, zwischenzeitlich die h_i unabhängig wählen zu können.

Wir schreiben Z_Λ als Polynom in einem in der Thermodynamik beliebigen Parameter, der *Aktivität* $z_i := e^{-2\beta h_i}$. Dazu gehen wir zunächst von H_Λ zu der nichtnegativen Energiefunktion \tilde{H}_Λ mit

$$\begin{aligned}\tilde{H}_\Lambda(\sigma) &:= -\frac{1}{2} \sum_{i \neq k \in \Lambda} j(i-k) (\sigma_i \sigma_k - 1) - \sum_{i \in \Lambda} h_i (\sigma_i - 1) \\ &= H_\Lambda(\sigma) + C_\Lambda \quad \text{mit} \quad C_\Lambda := \frac{1}{2} \sum_{i \neq k \in \Lambda} j(i-k) + \sum_{i \in \Lambda} h_i\end{aligned}$$

über. Damit ist

$$Z_\Lambda(\beta) = e^{\beta C_\Lambda} \cdot \tilde{Z}_\Lambda(\beta), \quad (9.2)$$

wobei $\tilde{Z}_\Lambda(\beta) := \sum_{\sigma \in E^\Lambda} \exp(-\beta \tilde{H}_\Lambda(\sigma))$ die Zustandssumme von \tilde{H}_Λ ist.

Unter Benutzung des Isomorphismus $E^\Lambda \rightarrow \mathcal{P}(\Lambda)$, $\sigma \mapsto \{i \in \Lambda \mid \sigma_i = -1\}$ lässt sich $\tilde{Z}_\Lambda(\beta)$ in der Form

$$\tilde{Z}_\Lambda(\beta) = \sum_{A \subseteq \Lambda} \prod_{i \in A} \left(z_i \cdot \prod_{k \in \Lambda - A} a_{i,k} \right)$$

mit $a_{i,k} := \exp(-2\beta j(i-k))$ schreiben, denn

$$e^{\beta h_i (\sigma_i - 1)} = \begin{cases} 1 & , \quad \sigma_i = 1 \\ z_i & , \quad \sigma_i = -1 \end{cases}$$

und

$$e^{\beta j(i-k) (\sigma_i \sigma_k - 1)} = \begin{cases} 1 & , \quad \sigma_i = \sigma_k \\ a_{i,k} & , \quad \sigma_i \neq \sigma_k \end{cases}.$$

Wir setzen wie üblich das Produkt über eine leere Menge = 1. Die Zustandssumme ist also ein Polynom in den Aktivitäten z_i mit Koeffizienten, die Produkte von Zahlen $0 < a_{i,k} \leq 1$ sind. In jeder der Variablen z_i ist dieses Polynom affin. Ab jetzt notieren wir als Argumente der Zustandssumme nicht mehr β sondern die Aktivitäten z_i .

Ist das betrachtete Teilgitter Λ klein, so ist die Nullstellenfreiheit der komplexifizierten Zustandssumme relativ leicht nachzuprüfen, denn \tilde{Z}_Λ ist ja ein Polynom vom Grad $|\Lambda|$. Die Kunst besteht darin, diese Information auf große Gebiete (und damit Polynome hohen Grades) zu übertragen.

9.1 Beispiel Schauen wir uns zunächst den einfachsten nichttrivialen Fall an, den eines zweielementigen Gebietes $\Lambda = \{i, k\}$. Dann ist

$$\tilde{Z}_\Lambda(z_i, z_k) = 1 + a_{i,k}(z_i + z_k) + z_i z_k.$$

Es ist leicht, Gebiete für z_i und z_k zu finden, auf denen $z_\Lambda \mapsto \tilde{Z}_\Lambda(z_\Lambda)$ nicht Null wird. Dies gilt z. B., wenn $|z_i|$ und $|z_k| > 1$ ist oder wenn $|z_i|$ und $|z_k| < 1$, siehe (9.6). Dies wiederum ist für $\beta > 0$ gewährleistet, wenn die äußeren Magnetfelder h_i und h_k beide echt kleiner Null bzw. echt größer Null sind.

Diese Teilinformation ist zwar verträglich mit unserem Ziel, Phasenübergangsfreiheit für nicht verschwindendes äußeres Magnetfeld zu beweisen. Für sich genommen ist sie aber noch wertlos.

Um nun einen Induktionsbeweis in der Größe $|\Lambda|$ des betrachteten Gebiets zu führen, stellen wir zunächst Folgendes fest. Ist $\Lambda_1, \Lambda_2 \in \mathcal{S}(d)$ und $\Lambda_1 \cap \Lambda_2 = \emptyset$, so ist $Z_{\Lambda_1 \cup \Lambda_2} = Z_{\Lambda_1} \cdot Z_{\Lambda_2}$, falls keine Wechselwirkung zwischen den Gebieten Λ_1 und Λ_2 besteht, d. h. $a_{i,k} = 1$ für $i \in \Lambda_1, k \in \Lambda_2$. In diesem Fall verwenden wir also das Produktpolynom. Es ist also naheliegend $\tilde{Z}_{\{1, \dots, n+1\}}$ mit dem Produkt

$$\tilde{Z}_{\{1, \dots, n\}}(z_1, \dots, z_n) \cdot \prod_{i=1}^n \tilde{Z}_{\{i, n+1\}}(z_i, z_{n+1}) \quad (9.3)$$

zu vergleichen, denn in diesem Produkt sind alle Wechselwirkungen zwischen den $n+1$ betrachteten Spins enthalten (zur Vereinfachung der Notation wurden diese mit den Indizes $1, \dots, n+1$ nummeriert).

Offenbar sind die beiden Ausdrücke ungleich, denn das Produkt (9.3) ist nicht mehr affin in den z_i . Andererseits kann $\tilde{Z}_{\{1, \dots, n+1\}}$ aus den Faktoren in (9.3) gewonnen werden, wenn man die Produktbildung durch die so genannte Asano-Kontraktion ersetzt. Ausgangspunkt ist die Feststellung, dass sich ein in den Variablen $z_\Lambda := (z_i)_{i \in \Lambda}$ affines Polynom P_Λ in der Form

$$P_\Lambda(z_\Lambda) = \sum_{A \subseteq \Lambda} C(A) \cdot \prod_{k \in A} z_k$$

schreiben lässt, wobei die Koeffizientenfunktion $C : \mathcal{P}(\Lambda) \rightarrow \mathbb{C}$ eindeutig festgelegt ist.

9.2 Definition Seien $\Lambda_1, \Lambda_2 \in \mathcal{S}$ und P_{Λ_i} Polynome in den z_{Λ_i} von der Form

$$P_{\Lambda_i}(z_{\Lambda_i}) = \sum_{A \subseteq \Lambda_i} C_i(A) \prod_{k \in A} z_k \quad (i = 1, 2).$$

Dann ist die **Asano-Kontraktion** $P_{\Lambda_1} \otimes_{\mathcal{A}} P_{\Lambda_2}$ das Polynom in den Variablen $z_{\Lambda_1 \cup \Lambda_2}$

$$P_{\Lambda_1} \otimes_{\mathcal{A}} P_{\Lambda_2}(z_{\Lambda_1 \cup \Lambda_2}) := \sum_{A \subseteq \Lambda_1 \cup \Lambda_2} C_1(A \cap \Lambda_1) \cdot C_2(A \cap \Lambda_2) \prod_{k \in A} z_k.$$

9.3 Bemerkung Das entstehende Polynom ist wieder affin und offensichtlich ist die Asano-Kontraktion kommutativ und assoziativ.

9.4 Beispiel Es seien

$$\begin{aligned}\Lambda_1 &:= \{1, 2\} \quad , \quad P_{\Lambda_1}(z_1, z_2) := 1 + a_{12}(z_1 + z_2) + z_1 z_2, \\ \Lambda_2 &:= \{2, 3\} \quad , \quad P_{\Lambda_2}(z_2, z_3) := 1 + a_{23}(z_2 + z_3) + z_2 z_3.\end{aligned}$$

Dann ist die Asano-Kontraktion der beiden Polynome gleich

$$P_{\Lambda_1} \otimes_A P_{\Lambda_2}(z_1, z_2, z_3) = (1 + a_{12}z_1)(1 + a_{23}z_3) + (a_{12} + z_1)(a_{23} + z_3)z_2.$$

9.5 Lemma Für $\Lambda \in \mathcal{S}$ sei $\tilde{Z}_\Lambda(z_\Lambda) = \sum_{A \subseteq \Lambda} \prod_{i \in A} z_i \cdot \prod_{k \in \Lambda - A} a_{ik}$.

Dann gilt

$$\tilde{Z}_{\{1, \dots, n+1\}} = \tilde{Z}_{\{1, \dots, n\}} \otimes_A \bigotimes_{i=1}^n \tilde{Z}_{\{i, n+1\}}. \quad (9.4)$$

Bew.: Wir bestimmen zunächst die Koeffizienten für die Paarwechselwirkungen mit dem $(n+1)$ -ten Spin:

$$\begin{aligned}\tilde{Z}_{\{i, n+1\}}(z_i, z_{n+1}) &= 1 + (z_i + z_{n+1})a_{i, n+1} + z_i \cdot z_{n+1} \\ &= \sum_{A \subseteq \{i, n+1\}} C_i(A) \prod_{k \in A} z_k\end{aligned}$$

mit $C_i(\emptyset) := 1$, $C_i(\{i\}) := C_i(\{n+1\}) := a_{i, n+1}$ und $C_i(\{i, n+1\}) := 1$.

Damit ist

$$\begin{aligned}& \left(\bigotimes_{i=1}^n \tilde{Z}_{\{i, n+1\}} \right) (z_1, \dots, z_{n+1}) \\ &= \sum_{A \subseteq \{1, \dots, n+1\}} \left(\prod_{i=1}^n C_i(A \cap \{i, n+1\}) \right) \cdot \prod_{k \in A} z_k \\ &= \sum_{A \subseteq \{1, \dots, n\}} \left(\prod_{i=1}^n C_i(A \cap \{i\}) \right) \prod_{k \in A} z_k + \\ & \quad \sum_{A \subseteq \{1, \dots, n\}} z_{n+1} \cdot \left(\prod_{i=1}^n C_i((A \cap \{i\}) \cup \{n+1\}) \right) \cdot \prod_{k \in A} z_k \\ &= \prod_{i=1}^n (1 + a_{i, n+1} z_i) + z_{n+1} \cdot \prod_{i=1}^n (z_i + a_{i, n+1}) \\ &= \sum_{A \subseteq \{1, \dots, n+1\}} D(A) \prod_{k \in A} z_k \\ \text{mit } D(A) &:= \begin{cases} \prod_{i \in A} a_{i, n+1} & , \quad n+1 \notin A \\ \prod_{k \in \{1, \dots, n\} \setminus A} a_{n+1, k} & , \quad n+1 \in A \end{cases}.\end{aligned}$$

Die rechte Seite der zu beweisenden Identität (9.4) lautet also

$$\begin{aligned}
& \left(\tilde{Z}_{\{1, \dots, n\}} \otimes_{\mathcal{A}} \bigotimes_{i=1}^n \tilde{Z}_{\{i, n+1\}} \right) (z_1, \dots, z_{n+1}) \\
&= \sum_{A \subseteq \{1, \dots, n\}} \prod_{i \in A} \left(\prod_{k \in \{1, \dots, n\} \setminus A} a_{i,k} \right) \cdot a_{i, n+1} z_i + \\
& \quad \sum_{A \subseteq \{1, \dots, n\}} \prod_{i \in A \cup \{n+1\}} \left(z_i \cdot \prod_{k \in \{1, \dots, n\} \setminus A} a_{i,k} \right) \\
&= \sum_{A \subseteq \{1, \dots, n+1\}} \prod_{i \in A} \left(z_i \prod_{k \in \{1, \dots, n+1\} \setminus A} a_{i,k} \right) = \tilde{Z}_{\{1, \dots, n+1\}}(z_1, \dots, z_{n+1}). \quad \square
\end{aligned}$$

Das Besondere an der Asano-Kontraktion ist nun, dass das Nullstellenverhalten des kontrahierten Polynoms kontrolliert werden kann:

9.6 Satz Seien $\Lambda_1, \Lambda_2 \in \mathcal{S}$ und P_{Λ_i} Polynome in den z_{Λ_i} von der Form

$$P_{\Lambda_i}(z_{\Lambda_i}) = \sum_{A \subseteq \Lambda_i} C_i(A) \cdot \prod_{k \in A} z_k \quad (i = 1, 2).$$

Seien für $k \in \Lambda_i$ die 'verbotenen Gebiete' $M_k^i \subseteq \mathbb{C} \setminus \{0\}$ abgeschlossene Mengen mit

$$P_{\Lambda_i}(z_{\Lambda_i}) \neq 0 \quad \text{falls} \quad z_k \notin M_k^i, \quad k \in \Lambda_i, \quad i = 1, 2.$$

Dann gilt mit $\Lambda := \Lambda_1 \cup \Lambda_2$

$$(P_{\Lambda_1} \otimes_{\mathcal{A}} P_{\Lambda_2})(z_{\Lambda}) \neq 0$$

für

$$z_k \notin \begin{cases} M_k^1 & , \quad k \in \Lambda \setminus \Lambda_2 \\ M_k^2 & , \quad k \in \Lambda \setminus \Lambda_1 \\ -M_k^1 \cdot M_k^2 & , \quad k \in \Lambda_1 \cap \Lambda_2 \end{cases}.$$

Bew.: Asano-Kontraktion von P_{Λ_1} und P_{Λ_2} bedeutet Ersetzen von Termen der Form

$$a + b\tilde{z}_k + c\hat{z}_k + d\tilde{z}_k\hat{z}_k \quad (k \in \Lambda_1 \cap \Lambda_2)$$

im Produktpolynom $P_{\Lambda_1}(\tilde{z}_{\Lambda_1}) \cdot P_{\Lambda_2}(\hat{z}_{\Lambda_2})$ durch den Term $a + dz_k$ (dabei sind die affinen Polynome a, b, c, d in z_{Λ} vom Grad 0 in z_k). Der Satz folgt damit aus dem folgenden Lemma. \square

9.7 Lemma Es seien $\emptyset \neq M_1, M_2 \subseteq \mathbb{C} \setminus \{0\}$ abgeschlossen, und es gelte

$$a + bz_1 + cz_2 + dz_1z_2 \neq 0 \quad (z_1 \notin M_1, z_2 \notin M_2).$$

Dann folgt

$$a + dz \neq 0 \quad (z \notin -M_1 \cdot M_2).$$

Bew.: • Aus der (wegen $0 \notin M_i$ möglichen) Wahl $z_1 := z_2 := 0$ folgt $a \neq 0$.

• Falls $d = 0$ ist, verschwindet $a + dz$ nie und wir sind fertig. Sei also auch $d \neq 0$.

• Falls $ad - bc = 0$, gilt

$$a + bz_1 + cz_2 + dz_1z_2 = d \left(z_1 + \frac{c}{d} \right) \left(z_2 + \frac{a}{c} \right),$$

also $-\frac{c}{d} \in M_1$, $-\frac{a}{c} \in M_2$ und $-\frac{a}{d} \in -M_1 \cdot M_2$.

$-\frac{a}{d}$ ist aber die Nullstelle von $a - dz$, sodass für diesen Fall das Lemma auch bewiesen ist.

• Wir nehmen also an, dass $ad - bc \neq 0$ ist und betrachten die Abbildungen $\varphi, \psi : \mathbb{P} \rightarrow \mathbb{P}$ der Riemannschen Zahlenkugel $\mathbb{P} = \mathbb{C} \cup \{\infty\}$, wobei

$$\varphi(z) := -\frac{a + bz}{c + dz} \quad \text{und} \quad \psi(z) := \frac{a}{dz}.$$

Für $z_1 \in \mathbb{P}$ löst $z_2 := \varphi(z_1)$ die Gleichung $a + bz_1 + cz_2 + dz_1z_2 = 0$. Beide Möbiustransformationen sind Isomorphismen, also auch $\omega := \varphi \circ \psi^{-1}$. Wir wollen zeigen, dass $\omega^2 = \text{Id}$, ω also eine Involution ist (es wird gleich klar werden, warum wir das zeigen wollen). Das folgt aber direkt durch Ausrechnen des "Quadrats" von

$$\omega(z) = -\frac{az + \frac{ba}{d}}{cz + a}.$$

Wir schließen, dass

$$\omega(M_2) \cap \overline{M_2^c} \neq \emptyset, \tag{9.5}$$

denn läge $\omega(M_2)$ im Inneren von M_2 , so wäre $\omega^2 \neq \text{Id}$.

Wir haben angenommen, dass $M_2^c \subseteq \varphi(M_1)$, oder äquivalent, dass $M_2^c \cap \varphi(M_1^c) = \emptyset$, denn aus $a + bz_1 + cz_2 + dz_1z_2 = 0$ folgt $z_2 = \varphi(z_1)$.

Da mit M_1 auch $\varphi(M_1)$ abgeschlossen ist, folgt sogar $\overline{M_2^c} \subseteq \varphi(M_1)$ oder mit (9.5)

$$\omega(M_2) \cap \varphi(M_1) \neq \emptyset.$$

Diese letzte Relation ist aber zu

$$M_2 \cap \psi(M_1) \neq \emptyset$$

äquivalent, denn $\omega^{-1}(= \omega) = \psi \circ \varphi^{-1}$. Daraus folgt aber die Existenz von Punkten $m_1 \in M_1$ und $m_2 \in M_2$ mit

$$m_2 = \frac{a}{dm_1} \quad \text{oder} \quad -\frac{a}{d} \in -M_1 M_2,$$

was zu beweisen war. □

Der folgende *Kreissatz von Lee und Yang* ist neben seiner Anwendung in der statistischen Mechanik auch innermathematisch interessant, siehe RUELLE [Ru2].

9.8 Satz (Lee-Yang) *Es sei $a_{i,k} = a_{k,i} \in \mathbb{C}$ ($i, k \in \{1, \dots, n\}$) mit $|a_{i,k}| \leq 1$, und $P \in \mathbb{C}[z]$ das Polynom n -ten Grades*

$$P(z) := \sum_{A \subseteq \{1, \dots, n\}} \prod_{i \in A} \left(z \cdot \prod_{k \in \{1, \dots, n\} - A} a_{i,k} \right).$$

Dann ist $P(z) \neq 0$ falls $|z| \neq 1$.

Bew.: Wir setzen $M_l := M := \{c \in \mathbb{C} \mid |c| \geq 1\}$, ($l \in \{1, \dots, n\}$). Wenn $|a_{i,k}| \leq 1$, ist für $z_i \notin M_i$, $z_k \notin M_k$

$$1 + a_{i,k}(z_i + z_k) + z_i z_k \neq 0. \tag{9.6}$$

- Denn für $a_{i,k} = -z_k$ ist $1 + a_{i,k}(z_i + z_k) + z_i z_k = 1 - z_k^2 \neq 0$, da nach Voraussetzung $|z_k| < 1$. Also gilt (9.6).
- Für $a_{i,k} \neq -z_k$ dagegen ist $1 + a_{i,k}(z_i + z_k) + z_i z_k = 1 - z_k^2 = 0$ äquivalent zu

$$z_i = -\frac{1 + a_{i,k} z_k}{a_{i,k} + z_k}$$

bzw. für $|z_k| < 1$

$$|z_i|^2 = \frac{1 + 2\operatorname{Re}(a_{i,k} \bar{z}_k) + |a_{i,k} z_k|^2}{|a_{i,k}|^2 + 2\operatorname{Re}(a_{i,k} \bar{z}_k) + |z_k|^2} \geq 1.$$

Denn dann ist der Nenner $|a_{i,k}|^2 + 2\operatorname{Re}(a_{i,k} \bar{z}_k) + |z_k|^2 = |a_{i,k} + z_k|^2$ positiv und die Differenz $(1 - |a_{i,k}|^2)(1 - |z_k|^2)$ zwischen Zähler und Nenner nichtnegativ. Wieder gilt (9.6).

M_l ist l -unabhängig und $-M \cdot M = M$. Daher folgt aus Satz 9.6, dass

$$\sum_{A \subseteq \{1, \dots, n\}} \prod_{i \in A} \left(z_i \cdot \prod_{k \in \{1, \dots, n\} - A} a_{i,k} \right) \neq 0,$$

falls $z_i \notin M_i$ für alle $i \in \{1, \dots, n\}$.

Das Analogon für $M := \{c \in \mathbb{C} \mid |c| \leq 1\}$ erhält man durch Spinumklapp. \square

Für den Lee-Yang-Satz in der Form 9.8 gibt es einen wesentlich kürzeren Beweis in [Ne], Kap. 3.

Nach dieser langen mathematischen Durststrecke wollen wir schauen, was aus dem bewiesenen Satz bezüglich der Phasenübergänge der Isingmodelle folgt (Isingmodell im erweiterten Sinn, nicht notwendigerweise nur Nächste-Nachbar-Wechselwirkung).

9.9 Satz Die Dichte $F \equiv F(\beta, h)$ der Freien Energie eines translationsinvarianten ferromagnetischen Paarpotentials endlicher Reichweite auf \mathbb{Z}^d ist für $(\beta, h) \in \mathbb{R}^+ \times (\mathbb{R} \setminus \{0\})$ reell-analytisch.

9.10 Bemerkung Für diese Parameterwerte treten also keine Phasenübergangspunkte auf. Wir wissen schon (Satz 8.3 und seine höherdimensionalen Verallgemeinerungen), dass für Dimension $d \geq 2$ des Gitters bei $h = 0$ für große β Phasenübergänge vorkommen können.

Bew.: • In Lemma 9.5 haben wir gesehen, dass wir Zustandssummen Z_Λ durch Asano-Kontraktion aus den Zustandssummen

$$Z_{\{i,k\}}(\beta, h) = 1 + a_{i,k}(\beta) \cdot (z_i(\beta h) + z_k(\beta h)) + z_i(\beta h) \cdot z_k(\beta h)$$

mit $a_{i,k}(\beta) = \exp(-2\beta j(i-k))$ und $z_l(x) = e^{-2x}$, $i, k, l \in \mathbb{Z}^d$, zusammensetzen können.

Wegen Satz 9.8 ist $\tilde{Z}_\Lambda(z_\Lambda) \neq 0$, falls kein $i \in \Lambda$ im (i -unabhängigen) verbotenen Gebiet $M_i = \{z \in \mathbb{C} \mid |z| \geq 1\}$ liegt. Wir betrachten nun die in \mathbb{C}^2 offene, zusammenhängende und den physikalischen Parameterbereich $D' := \mathbb{R}^+ \times \mathbb{R}^+$ enthaltende Menge

$$D := \{(\beta, h) \in \mathbb{C}^2 \mid |\operatorname{Im}(\beta)| < \operatorname{Re}(\beta), |\operatorname{Im}(h)| < \operatorname{Re}(h)\}.$$

- Die analogen Aussagen für den von $\mathbb{R}^+ \times (\mathbb{R} \setminus \{0\})$ noch fehlenden Parameterbereich $\mathbb{R}^+ \times (-\infty, 0)$ folgen aus denen für D durch Spinumklapp.
- Für $(\beta, h) \in D$ ist $\operatorname{Re}(\beta h) > 0$, also $|z_l(\beta h)| < 1$. Damit können wir für $z_i \equiv e^{-2\beta h}$ die $|\Lambda|$ -te Wurzel der Zustandssumme als stetige Funktion

$$\tilde{f}_\Lambda : D \rightarrow \mathbb{C} \setminus \{0\} \quad , \quad (\beta, h) \mapsto (\tilde{Z}_\Lambda(z_\Lambda))^{1/|\Lambda|}$$

definieren. Dies führt zu den stetig auf D fortgesetzten Freien Energien

$$\tilde{F}_\Lambda : D \rightarrow \mathbb{C} \quad , \quad (\beta, h) \mapsto -\frac{\log(\tilde{Z}_\Lambda(z_\Lambda))}{\beta|\Lambda|} := -\frac{1}{\beta} \log(\tilde{f}_\Lambda).$$

- Diese Funktionen haben die folgenden Eigenschaften:

1. Für Kompakta $K \subseteq D$ existiert eine Λ -unabhängige Konstante $c_K > 0$ mit

$$\sup_{(\beta, h) \in K} |\tilde{f}_\Lambda(\beta, h)| \leq |E| \sup_{(\beta, h) \in K} \sup_{\sigma \in E^\Lambda} \exp\left(\frac{|\beta \tilde{H}_\Lambda(\sigma)|}{|\Lambda|}\right) < c_K.$$

2. Nach Satz 6.11 existiert für $(\beta, h) \in D' = \mathbb{R}^+ \times \mathbb{R}^+$ und jede van-Hove-Folge $(\Lambda_n)_{n \in \mathbb{N}}$ der thermodynamische Limes $F(\beta, h) = \lim_{n \rightarrow \infty} F_{\Lambda_n}(\beta, h)$ der Dichte F_Λ der Freien Energie von (9.1). Also existiert auch

$$\tilde{F}(\beta, h) := \lim_{n \rightarrow \infty} \tilde{F}_{\Lambda_n}(\beta, h),$$

denn nach (9.2) ist in D'

$$\tilde{F}_\Lambda(\beta, h) = F_\Lambda(\beta, h) + C_\Lambda/|\Lambda|,$$

und

$$\hat{C} := \lim_{\Lambda \rightarrow \infty} \frac{C_\Lambda}{|\Lambda|} = \lim_{\Lambda \rightarrow \infty} \frac{\sum_{i, k \in \Lambda} j(i - k) + \sum_{i \in \Lambda} h}{|\Lambda|} = h + \sum_{\ell \in \mathbb{Z}^d} j(\ell).$$

Daher existiert auch $\lim_{n \rightarrow \infty} \tilde{f}_{\Lambda_n}(\beta, h)$ auf D' .

Nach dem Satz von Vitali²⁰ aus der Funktionentheorie existiert daher der Limes $\lim_{n \rightarrow \infty} \tilde{f}_{\Lambda_n}(\beta, h)$ auf ganz D und ist eine reell-analytische Funktion $\tilde{f} : D \rightarrow \mathbb{C}$.

• Diese Funktion besitzt in ganz D keine Nullstelle. Es ist zunächst klar, dass sie keine Nullstelle im physikalischen Bereich $D' \subset D$ besitzt, denn sonst wäre ja die Freie Energie

$$\tilde{F}(\beta, h) = -\log(\tilde{f}(\beta, h))/\beta$$

unendlich. Wir wenden für alle $\beta_0 \in D_1 := \{c \in \mathbb{C} \mid \text{Im}(c) < \text{Re}(c)\}$ einen funktionentheoretischen Satz von Hurwitz²¹ auf die Folge $h \mapsto \tilde{f}_{\Lambda_n}(\beta_0, h)$ von Funktionen $D_1 \rightarrow \mathbb{C}$ an. Die erste Alternative, dass nämlich \tilde{f} auf $\{\beta_0\} \times D_1$

²⁰**Satz von Vitali:** Es sei $D \subseteq \mathbb{C}^d$ offen und zusammenhängend und $(f_n)_{n \in \mathbb{N}}$ eine Folge auf D analytischer Funktionen mit **1)** $\sup_{n \in \mathbb{N}} \sup_{z \in K} |f_n(z)| < \infty$ auf Kompakta $K \subseteq D$ und **2)** es existiert eine Menge $D' \subseteq D$, sodass $\lim_{n \rightarrow \infty} f_n(z)$ für $z \in D'$ existiert, wobei jede auf D' verschwindende analytische Funktion $g : D \rightarrow \mathbb{C}$ auf ganz D verschwinde.

Dann konvergieren die f_n gleichmäßig auf Kompakta $K \subseteq D$ gegen eine analytische Funktion $f : D \rightarrow \mathbb{C}$.

²¹**Satz von Hurwitz:** Konvergiert eine Folge $f_n : D \rightarrow \mathbb{C}$ von auf der offenen und zusammenhängenden Menge $D \subseteq \mathbb{C}$ analytischen nullstellenfreien Funktionen gleichmäßig auf Kompakta gegen $f : D \rightarrow \mathbb{C}$, dann verschwindet f entweder, oder f besitzt gar keine Nullstellen.

identisch verschwindet, kann nicht eintreten. Dass diese Funktion nicht konstant ist, kann man z.B. durch Auswertung der Ableitung sehen:

$$\frac{d}{dh} \tilde{f}_\Lambda(\beta_0, h) = \beta_0 \tilde{f}_\Lambda(\beta_0, h) \frac{\sum_{\sigma \in E^\Lambda} (\sum_{k \in \Lambda} \sigma_k) \exp(-\beta_0 \tilde{H}_\Lambda(\sigma))}{\sum_{\sigma \in E^\Lambda} \exp(-\beta_0 \tilde{H}_\Lambda(\sigma))}$$

ist für reelle β_0 proportional zum Erwartungswert der mittleren Magnetisierung, und dieser verschwindet im thermodynamischen Limes für $h > 0$ nicht. Gleiches gilt für $\beta_0 \in D_1$. Als Konsequenz kann \tilde{f} überhaupt keine Nullstelle in D besitzen. • Also sind $\tilde{F} : D \rightarrow \mathbb{C}$ und damit die Freie Energie $F = \tilde{F} - \hat{C}$ auf D reell-analytisch. \square

9.11 Bemerkung Analog lässt sich beweisen, dass für kleine $\beta < \beta_0$ die Freie Energie für beliebige h in beiden Variablen reell-analytisch ist. Es lässt sich nämlich zeigen, dass die Zustandssumme $\tilde{Z}_{\{i,k\}}$ ungleich Null ist, wenn z_i und z_k sich beide nicht in einer kleinen Kreisscheibe M um $z = -1$ befinden. Der Radius dieser Kreisscheibe kann für $\beta \searrow 0$ beliebig klein gewählt werden.

Bezeichnen wir die Kreisscheibe für den Spin am Gitterpunkt $i \in \Lambda$ mit M_i . Bei Asano-Kontraktion werden mengentheoretischen Potenzen $-(-M_i)^a$ gebildet. Für jeden Gitterpunkt $i \in \Lambda$ ist die Anzahl a der vorkommenden Faktoren gleich der Zahl der $k \in \Lambda \subseteq \mathbb{Z}^d$ mit $j(i-k) \neq 0$, also endlich für ein Potential endlicher Reichweite. Das Produktgebiet hat damit für kleine β die links in

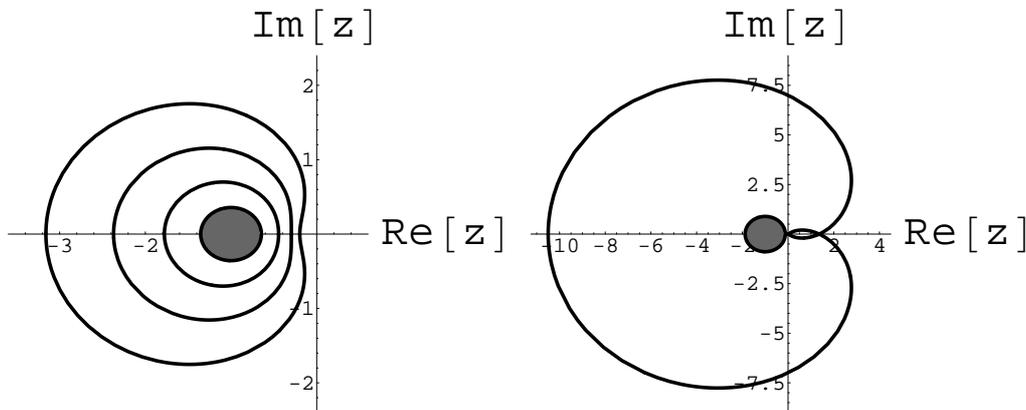


Abbildung 9.1: Links: Kreisscheibe M vom Radius $1/3$ in der Aktivitätsebene um $z = -1$, und ihre mengentheoretischen Potenzen $-(-M)^k$, für $k = 2, 3, 4$. Rechts: Kreisscheibe M vom Radius $4/5$, und $-(-M)^4$.

Abb. 9.1 dargestellte Form, während für große β (Abb. 9.1, rechts) die positive z -Halbachse berührt wird.

Da $h = -\frac{1}{2\beta} \ln z$, ist damit die Freie Energie für kleine $\beta > 0$ in $h \in \mathbb{R}$ reell-analytisch.

9.2 Eindeutiges Gibbsmaß bei hohen Temperaturen

Für fehlende Wechselwirkung, d. h. $J = 0$, ist das einzige Gibbsmaß auf $\Omega = E^{\mathbb{Z}^d}$ das Produktmaß $\otimes_{\ell \in \mathbb{Z}^d} \mu$ (wobei $\mu(\{-1\}) = \mu(\{+1\}) = \frac{1}{2}$). Für betragsmäßig kleine Wechselwirkung $J : \mathcal{S}(d) \rightarrow \mathbb{R}$ wird man immer noch Eindeutigkeit des Gibbsmaßes, d. h. $\mathcal{G}(J) = \{\mathbb{P}\}$, erwarten, mit \mathbb{P} nahe beim Produktmaß. Dies soll jetzt bewiesen werden.

Eine Beweisstrategie könnte darin bestehen, von einem beliebigen Maß auf Ω ausgehend, nacheinander für die Gitterpunkte $\ell \in \mathbb{Z}^d$ das Maß so zu verändern, dass die bedingten Wahrscheinlichkeiten für $\sigma_\ell = \pm 1$ unter der Hypothese einer vorgegebenen Konfiguration aller mit σ_ℓ wechselwirkenden Spins die durch J festgelegten Werte besitzen.

Es reicht allerdings nicht aus, dies für jedes $\ell \in \mathbb{Z}^d$ einmal zu tun, denn durch die Modifikation bei ℓ werden die bedingten Wahrscheinlichkeiten für die mit ℓ wechselwirkenden Spins wieder verfälscht.

Ziel wäre also die Konstruktion einer kontrahierende Abbildung auf dem Raum $M(\Omega)$ der Wahrscheinlichkeitsmaße von Ω , deren Fixpunkt das gesuchte Gibbsmaß \mathbb{P} ist.

Im vorliegenden, von Dobrushin stammenden, Eindeutigkeitsbeweis wird dual zur obigen Argumentation eine von der Wechselwirkung abhängige Abbildung $T : C(\Omega) \rightarrow C(\Omega)$ auf der Observablenalgebra konstruiert, die für kleine J die Variation der Funktionen f vermindert, und deren Grenzwert $\lim_{n \rightarrow \infty} T^n(f)$ konstant ist. Dieser Grenzwert ist dann gleich dem Erwartungswert von f .

Wir wissen schon, dass für $d \geq 2$ das Gibbsmaß für starke Wechselwirkungen i.A. nicht mehr eindeutig zu sein braucht. Das beschriebene Verfahren wird also nur für betragsmäßig kleines J funktionieren. Um zu sehen, wo seine Grenzen liegen, betrachten wir zunächst das Isingmodell auf \mathbb{Z}^d .

9.12 Beispiel (Isingmodell auf \mathbb{Z}^d) Das Potential soll eine translations- und rotationsinvariante Wechselwirkung zwischen nächsten Nachbarn sein, d. h. für ein $j \in \mathbb{R}$ sei $J(\Lambda) = j$ falls $\Lambda = \{i, k\}$ mit $\|i - k\|_1 = 1$ und $J(\Lambda) = 0$ sonst. Für $\ell \in \mathbb{Z}^d$ ist also $H_{\{\ell\}}^\tau(\sigma) = -j\sigma \cdot \left(\sum_{k: \|k-\ell\|_1=1} \tau_k \right)$. Wie in Anhang D über die Mean-Field-Theorie gezeigt wird, ist eine stabile selbstkonsistente Lösung mit Erwartungswert $s = \langle \sigma_i \rangle_s(\beta) = 0$ für das Produktmaß nur möglich, wenn $\beta j \leq \frac{1}{2d}$ ist, denn die Zahl der Nachbarn des ℓ -ten Spins ist $2d$.

Im folgenden setzen wir ohne Beschränkung der Allgemeinheit $\beta = 1$. Es läßt sich zeigen, daß im Limes großer Dimension $2d \cdot j_{\text{cr}}(d)$ gegen Eins konvergiert,

wobei $j_{\text{cr}}(d) > 0$ die kritische Größe der Wechselwirkung des d -dimensionalen Isingmodells ist, unterhalb derer kein Phasenübergang auftritt.

Die obige Bedingung $2dj < 1$ für die Eindeutigkeit der Phase im Mean-Field-genäherten Isingmodell entspricht asymptotisch (für große d) der Voraussetzung des folgenden Eindeutigkeitsatzes. Eine diesem Satz noch ähnelnde Bedingung liefert die sog. Bethe-Näherung, siehe z.B. [TKS].

9.13 Satz *Gilt für ein translationsinvariantes Potential $J : \mathcal{S}(d) \rightarrow \mathbb{R}$ auf \mathbb{Z}^d die Abschätzung*

$$\sum_{\Lambda \in \mathcal{S}(d): 0 \in \Lambda} (|\Lambda| - 1) \tanh(|J_\Lambda|) < 1,$$

dann existiert nur eine Phase, d.h. $|\mathcal{G}(J)| = 1$.

Bew.: Die Argumentation folgt der in [Sim].

• \mathbb{P} wird durch Angabe der Erwartungswerte $\langle f \rangle_{\mathbb{P}}$ beliebiger stetiger Funktionen $f \in C(\Omega)$ fixiert. Dabei ist zwar $\Omega = E^{\mathbb{Z}^d}$ mit $E = \{-1, 1\}$, aber wir benutzen konkret eine Abzählung der Gitterpunkte von \mathbb{Z}^d durch die natürlichen Zahlen, sodass Ω isomorph zu $E^{\mathbb{N}}$ wird. Die Erwartungswerte gewinnen wir dabei durch Konstruktion einer linearen Abbildung

$$T : C(\Omega) \rightarrow C(\Omega),$$

für die mit

$$f_- := \inf_{\omega \in \Omega} f(\omega) \quad , \quad f_+ := \sup_{\omega \in \Omega} f(\omega) \quad (f \in C(\Omega))$$

gilt:

$$f_- \leq T(f)_- \leq T(f)_+ \leq f_+ \quad (f \in C(\Omega)) \quad (9.7)$$

und sogar

$$\lim_{n \rightarrow \infty} (T^n(f)_+ - T^n(f)_-) = 0. \quad (9.8)$$

Aus (9.7) und (9.8) folgt nicht nur die Existenz der Limesfunktion $\lim_{n \rightarrow \infty} T^n(f)$, sondern auch, dass diese konstant ist, und wir zeigen, dass dieser konstante Wert gleich dem Erwartungswert $\langle f \rangle_{\mathbb{P}}$ bezüglich eines beliebigen Gibbsmaßes $\mathbb{P} \in \mathcal{G}(J)$ ist. Dies impliziert dann die Eindeutigkeit von \mathbb{P} .

• Die Idee bei der Konstruktion von T ist, bezüglich jedes Spins ω_ℓ mit ℓ aus $\mathbb{N} \cong \mathbb{Z}^d$ die Funktion f so zu mitteln, wie dies dem Boltzmanngewicht von ω_ℓ bezüglich aller anderen Spins entspricht. Wir benutzen dafür die linearen Abbildungen

$$\Phi_\ell : C(\Omega) \rightarrow C(\Omega) \quad , \quad \Phi_\ell(f)(\omega) := \mu_\ell^\omega(-1) \cdot f(\omega_\ell^-) + \mu_\ell^\omega(1) \cdot f(\omega_\ell^+),$$

wobei für $\omega \in \Omega$

$$\omega_\ell^\pm \in \Omega \quad \text{die Konfigurationen} \quad (\omega_\ell^\pm)_k := \begin{cases} \omega_k & , \quad k \neq \ell \\ \pm 1 & , \quad k = \ell \end{cases}$$

sind. Das Gewicht $\mu_\ell^\omega : E \rightarrow [0, 1]$ ist durch

$$\mu_\ell^\omega(\pm 1) := \frac{e^{\pm J_\ell(\omega)}}{e^{J_\ell(\omega)} + e^{-J_\ell(\omega)}} \quad \text{mit} \quad J_\ell(\omega) := \sum_{\substack{\Lambda \in \mathcal{S} \\ \Lambda \ni \ell}} J(\Lambda) \prod_{k \in \Lambda \setminus \{\ell\}} \omega_k \quad (9.9)$$

definiert und beschreibt die Wahrscheinlichkeiten der beiden Einstellungen des ℓ -ten Spins bei Fixierung der anderen Spins.

Für die Gibbsmaße $\mathbb{P} \in \mathcal{G}(J)$ gilt

$$\langle \Phi_\ell(f) \rangle_{\mathbb{P}} = \langle f \rangle_{\mathbb{P}} \quad (f \in C(\Omega), \ell \in \mathbb{Z}^d),$$

und es gilt das Analogon $f_- \leq \Phi_\ell(f)_- \leq \Phi_\ell(f)_+ \leq f_+$ von (9.7).

Nach Mittelung mit Φ_ℓ ist der Funktionswert unabhängig vom ℓ -ten Spin, d.h. $\Phi_\ell(f)(\omega_\ell^+) = \Phi_\ell(f)(\omega_\ell^-)$.

- Wir setzen bezüglich der Abzählung von \mathbb{Z}^d

$$T := \lim_{n \rightarrow \infty} \Phi_1 \circ \Phi_2 \circ \dots \circ \Phi_{n-1} \circ \Phi_n. \quad (9.10)$$

Der Limes $\lim_{n \rightarrow \infty} \Phi_1 \circ \dots \circ \Phi_n(f)$ existiert zunächst für $f \in L$, mit dem Unterraum $L \subset C(\Omega)$ der lokalen Funktionen (siehe Seite 59). L ist aber nach Aufgabe 5.15 in $C(\Omega)$ dicht, und die linearen Operatoren $\Phi_1 \circ \dots \circ \Phi_n$ haben alle Operatornorm 1. Nach dem BLT-Satz ²² existiert der Limes $T : C(\Omega) \rightarrow C(\Omega)$ in (9.10) und besitzt Operatornorm $\|T\| = 1$.

- Wir können zwar nicht erwarten, dass $T(f)$ eine konstante Funktion ist, denn auch falls $f \in C(\Omega)$ von einem Gitterpunkt $k \in \mathbb{Z}^d$ unabhängig ist ($f(\omega_{\bar{k}}^-) = f(\omega_{\bar{k}}^+)$ für alle $\omega \in \Omega$), folgt daraus nicht $\Phi_\ell(f)(\omega_{\bar{k}}^-) = \Phi_\ell(f)(\omega_{\bar{k}}^+)$.

Mit der *Fluktuations-Halbnorm* Δ auf $F := \{f \in C(\Omega) \mid \Delta(f) < \infty\}$

$$\Delta(f) := \sum_{n=1}^{\infty} \delta_n(f) \quad \text{mit} \quad \delta_\ell(f) := \sup_{\omega \in \Omega} |f(\omega_\ell^+) - f(\omega_\ell^-)| \quad (9.11)$$

²²Satz über beschränkte lineare Transformationen, BLT

Es seien $(\bar{V}, \|\cdot\|_{\bar{V}})$ und $(W, \|\cdot\|_W)$ Banachräume (über \mathbb{R} oder \mathbb{C}) und $V \subset \bar{V}$ ein dichter Unterraum. Dann kann jede beschränkte lineare Abbildung $T : V \rightarrow W$ eindeutig zu einer beschränkten linearen Abbildung $\bar{T} : \bar{V} \rightarrow W$ mit der gleichen Operatornorm

$$\|\bar{T}\| \equiv \sup_{\bar{v} \in \bar{V} : \|\bar{v}\|_{\bar{V}}=1} \|\bar{T}\bar{v}\|_W = \|T\|$$

fortgesetzt werden.

verkleinert T die Fluktuation von f , es gibt nämlich nach den diesem Beweis folgenden Lemmata 9.14 und 9.15 ein $\alpha \in [0, 1)$ mit

$$\Delta(T(f)) \leq \alpha \Delta(f) \quad (f \in F), \quad (9.12)$$

also

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \Delta(T^n(f)) = 0.$$

• Nun ist

$$0 \leq f_+ - f_- \leq \Delta(f) \quad (f \in F), \quad (9.13)$$

denn dies folgt auf F , wenn es für die lokalen Funktionen $f \in L \subset F$ gilt, die nur von endlich vielen Spins abhängen. Für letztere gibt es aber Paare $\omega^{(+)}, \omega^{(-)} \in \Omega$ von Konfigurationen mit $f_+ = f(\omega^{(+)})$, $f_- = f(\omega^{(-)})$, die nur auf einer endlichen Menge

$$\Lambda' := \left\{ k \in \mathbb{Z}^d \mid \omega_k^{(+)} \neq \omega_k^{(-)} \right\}$$

von Gitterpunkten voneinander abweichen. Durch Umklapp der Spins in Λ' können wir also ω^+ in ω^- verwandeln, und (9.13) folgt aus der Dreiecksungleichung. (9.13) und (9.12) implizieren aber (9.8). \square

Zur Definition der Konstante α in (9.12) setzen wir nun

$$\rho_{k,\ell} := \frac{1}{2} \sup_{\omega \in \Omega} \left\| \mu_\ell^{\omega_k^+} - \mu_\ell^{\omega_k^-} \right\| \quad (k \neq \ell \in \mathbb{Z}^d)$$

mit der in (9.9) definierten Wahrscheinlichkeitsverteilung μ_ℓ^ω auf E , und der 1-Norm

$$\|\mu - \nu\| = \sum_{\sigma \in E} |\mu(\sigma) - \nu(\sigma)|.$$

Die folgenden Lemmata sollen als Übungsaufgaben bewiesen werden:

9.14 Lemma *Ist $f \in F$, besitzt f also eine endliche Fluktuation $\Delta(f)$ mit Δ aus (9.11), und ist $\alpha := \sup \left\{ \sum_{k \in \mathbb{N} \setminus \{\ell\}} \rho_{k,\ell} \mid \ell \in \mathbb{N} \right\} < 1$, dann gilt*

$$T(F) \subseteq F \quad \text{und} \quad \Delta(T(f)) \leq \alpha \Delta(f).$$

9.15 Lemma *Für α aus Lemma 9.14 gilt die Abschätzung*

$$\alpha \leq \sum_{\Lambda \ni 0} (|\Lambda| - 1) \tanh(|J_\Lambda|).$$

9.3 Die Hochtemperaturentwicklung

Diese Technik gestattet es, für hohe Temperaturen den exponentiellen Abfall von Korrelationen zu beweisen. Wir wenden sie exemplarisch auf das d -dimensionale Isingmodell und Zweipunktkorrelationen an. Die Methode lässt sich aber leicht auf andere Gittermodelle und Korrelationsfunktionen, ja sogar auf quantenmechanische Spins verallgemeinern.

Grundidee ist eine Potenzreihenentwicklung in der inversen Temperatur β , genauer gesagt im kleinen Parameter $\tanh(\beta)$, unter Anwendung der Identität

$$\exp(\pm\beta) = \cosh(\beta) \cdot (1 \pm \tanh(\beta)). \quad (9.14)$$

In diesem Fall ist der Term $\tanh(\beta) \approx \beta$ in (9.14) gegenüber 1 eine kleine Störung.

9.16 Satz *Ist für das d -dimensionale Isingmodell ohne äußeres Magnetfeld die nächste-Nachbarwechselwirkung von der Stärke $|j| \leq 1$, dann gilt für inverse Temperaturen $\beta \in [0, \arctan(1/(2d))]$ und ein geeignetes $C(\beta) > 1$*

$$|\langle s_a s_b \rangle(\beta)| \leq C(\beta) \exp\left(-\frac{\|a-b\|_1}{L(\beta)}\right) \quad (a, b \in \mathbb{Z}^d) \quad (9.15)$$

mit der oberen Schranke $L(\beta) := \frac{1}{\ln(\frac{\cosh \beta}{2d-1})}$ an die Korrelationslänge.

9.17 Bemerkungen 1. Da nach Satz 9.13 für die betrachteten inversen Temperaturen β das Gibbsmaß eindeutig ist, ist auch $\langle s_a s_b \rangle(\beta)$ wohldefiniert.

2. Für $\beta > 0$ und ferromagnetische Wechselwirkung ($j = 1$) ist nach der 1. GKS-Ungleichung (Satz 8.9) $\langle s_a s_b \rangle(\beta) \geq 0$. Wie aus dem Beweis von Satz 9.16 folgen wird, gilt sogar die strikte Ungleichung.

Für *antiferromagnetische* Wechselwirkung ($j = -1$) ist $\text{sign} \langle s_a s_b \rangle(\beta) = (-1)^{\|a-b\|_1}$. Dies folgt aus der durch Spinumklapp (5.9) gegebenen Beziehung zum ferromagnetischen Fall.

3. Für $d = 1$, also die Spinkette, ist die Schranke $L(\beta)$ an die Korrelationslänge exakt, vergleiche mit (8.4).

Aus dem Beweis des Satzes werden wir sehen, dass (da für $d = 1$ immer $|\mathcal{G}(\beta J)| = 1$ ist) die Abschätzung (9.15) für beliebige $\beta > 0$ gilt.

Bew.: • Aus Bemerkung 9.17.2 folgt, dass wir uns auf den ferromagnetischen Fall mit $j = 1$ beschränken können.

- Wir betrachten das Isingmodell mit freien Randbedingungen auf $\Lambda \equiv \Lambda_l := \{-l, \dots, l\}^d \in \mathcal{S}(d)$. Wir bemerken, dass aus der Gültigkeit des Eindeutigkeitsatzes 9.13 folgt, dass $\langle s_a s_b \rangle(\beta) = \lim_{l \rightarrow \infty} \langle s_a s_b \rangle_l(\beta)$ gilt.
- Zur Vereinfachung der Schreibweise machen wir Λ zur Vertexmenge eines Graphen mit Kantenmenge

$$\mathcal{E} := \{\{i, k\} \subseteq \Lambda \mid \|i - k\|_1 = 1\}.$$

Die Zustandssumme des Isingmodells ist gleich

$$Z_\Lambda(\beta) = \sum_{\sigma \in E^\Lambda} \exp\left(\beta \sum_{\{i, k\} \in \mathcal{E}} \sigma_i \sigma_k\right) = \sum_{\sigma \in E^\Lambda} \prod_{\{i, k\} \in \mathcal{E}} \exp(\beta \sigma_i \sigma_k). \quad (9.16)$$

Unter Verwendung von (9.14) schreiben wir (9.16) in der Form

$$\begin{aligned} Z_\Lambda(\beta) &= (\cosh(\beta))^{|\mathcal{E}|} \sum_{\sigma \in E^\Lambda} \prod_{\{i, k\} \in \mathcal{E}} (1 + \sigma_i \sigma_k \tanh(\beta)) \\ &= (\cosh(\beta))^{|\mathcal{E}|} \sum_{\gamma \subseteq \mathcal{E}} (\tanh(\beta))^{|\gamma|} \sum_{\sigma \in E^\Lambda} \prod_{\{i, k\} \in \gamma} \sigma_i \sigma_k. \end{aligned} \quad (9.17)$$

Nach Summation über $\sigma \in E^\Lambda$ fallen im ausmultiplizierten Produkt von (9.17) genau diejenigen Terme weg, die mindestens ein σ_l in ungerader Potenz enthalten.

Mit $N_E(v) := \{w \in V \mid \{v, w\} \in E\}$ bezeichnen wir die Menge aller Nachbarn des Knotens $v \in V$ eines Graphen (V, E) . Damit ist für

$$\Gamma := \{\gamma \subseteq \mathcal{E} \mid \forall i \in \Lambda : |N_\gamma(i)| \text{ ist gerade}\}$$

also die Menge der Graphen (Λ, γ) , bei denen alle Gitterpunkte $i \in \Lambda$ eine gerade Anzahl von Nachbarn $k \in \Lambda$ besitzen,

$$Z_\Lambda(\beta) = |E^\Lambda| (\cosh(\beta))^{|\mathcal{E}|} \sum_{\gamma \in \Gamma} (\tanh(\beta))^{|\gamma|}. \quad (9.18)$$

- Der formal führende Term in der Potenzreihe (9.18) ist der zu $\gamma = \emptyset$. Danach ist (für $d \geq 2$) die kleinste in (9.18) auftauchende Potenz $|\gamma| = 4$, aber die Anzahl dieser Terme wächst asymptotisch proportional zu $|\Lambda|$. Es ist also wenig sinnvoll, für die Zustandssumme selbst die Koeffizienten der Potenzreihe in $\tanh(\beta)$ abzuschätzen.

Statt dessen sollen die Koeffizienten der Zweipunktkorrelationsfunktion

$$\langle s_a s_b \rangle_l(\beta) = \frac{1}{Z_\Lambda(\beta)} \sum_{\sigma \in E^\Lambda} \sigma_a \sigma_b \exp\left(\beta \sum_{\{i, k\} \in \mathcal{E}} \sigma_i \sigma_k\right) \quad (a \neq b \in \Lambda)$$

in Abhängigkeit vom Abstand $\|a - b\|_1$ abgeschätzt werden. Es ergibt sich

$$\langle s_a s_b \rangle_l(\beta) = \frac{\sum_{\sigma \in E^\Lambda} \sigma_a \sigma_b \prod_{\{i,k\} \in \mathcal{E}} (1 + \sigma_i \sigma_k \tanh(\beta))}{\sum_{\sigma \in E^\Lambda} \prod_{\{i,k\} \in \mathcal{E}} (1 + \sigma_i \sigma_k \tanh(\beta))}.$$

Mit der Graphenmenge

$$\Gamma_{a,b} := \left\{ \gamma \subseteq \mathcal{E} \mid |N_\gamma(a)|, |N_\gamma(b)| \text{ ungerade}, \forall i \in \Lambda \setminus \{a, b\} : |N_\gamma(i)| \text{ gerade} \right\}$$

ist

$$\langle s_a s_b \rangle_l(\beta) = \frac{\sum_{\gamma \in \Gamma_{a,b}} (\tanh(\beta))^{|\gamma|}}{\sum_{\gamma \in \Gamma} (\tanh(\beta))^{|\gamma|}}. \quad (9.19)$$

Die Formel für den Zähler in (9.19) wird analog zur Formel (9.18) abgeleitet.

• Da die Kantenmenge \mathcal{E} endlich ist, müssen für alle Graphen mit Kantenmenge $\gamma \in \Gamma_{a,b}$ die Punkte a und b durch einen in γ liegenden Weg verbunden sein. Ein solcher Weg der Länge L hat die Form (v_0, \dots, v_L) mit $v_i \in \Lambda$, $\{v_i, v_{i+1}\} \in \mathcal{E}$, $v_0 = a$ und $v_L = b$. Wir können ihn statt durch die Ecken v_i ebenso gut durch die Kanten beschreiben. Damit beschreibt

$$W_{a,b}^L := \left\{ (\{v_0, v_1\}, \{v_1, v_2\}, \dots, \{v_{L-1}, v_L\}) \mid v_0 = a, v_L = b, \right. \\ \left. v_i \neq v_k \text{ für } i \neq k, \{v_{i-1}, v_i\} \in \mathcal{E} \right\}$$

die Menge dieser (eckendisjunkten) Wege. Wir schätzen ab:

$$\begin{aligned} |\langle s_a, s_b \rangle_l| &\leq \frac{\sum_{L=1}^{\infty} \sum_{\gamma' \in W_{a,b}^L} \sum_{\gamma'' \in \Gamma} (\tanh(\beta))^{|\gamma'| + |\gamma''|}}{\sum_{\gamma \in \Gamma} (\tanh(\beta))^{|\gamma|}} \quad (9.20) \\ &= \sum_{L=1}^{\infty} \sum_{\gamma \in W_{a,b}^L} (\tanh(\beta))^L. \end{aligned}$$

Im Allgemeinen wird die Ungleichung in (9.20) strikt sein, denn

1. die meisten $\gamma \in \Gamma_{a,b}$ aus (9.19) lassen sich auf mehr als eine Weise in der Form $\gamma = \gamma' \dot{\cup} \gamma''$ mit $\gamma' \in W_{a,b}^L$ und $\gamma'' \in \Gamma$ zerlegen.
2. In der Summe (9.20) besitzen γ' und γ'' evtl. gemeinsame Kanten.

Nun ist für $L < \|a - b\|_1$ die Menge $W_{a,b}^L$ leer. Für größere L schätzen wir $|W_{a,b}^L|$ analog zur Menge der geschlossenen Wege in Lemma 8.2 des Peierlsargumentes ab.

Für v_1 kommen alle $2d$ nächsten Nachbarn von $v_0 = a$ in Frage, während wegen der Forderung $v_i \neq v_{i-2}$ für $i = 2, \dots, L$ höchstens $2d-1$ Wahlmöglichkeiten existieren. Somit ist

$$|W_{a,b}^L| \leq \frac{2d}{2d-1} (2d-1)^L$$

und für

$$x(\beta) := (2d-1) \tanh(\beta) < 1 \quad \text{und} \quad C(\beta) := \frac{2d}{2d-1} \frac{1}{1-x} > 1$$

folgt aus (9.20)

$$|\langle s_a s_b \rangle_l| \leq \frac{2d}{2d-1} \sum_{L=\|a-b\|_1}^{\infty} x^L = C x^{\|a-b\|_1} \quad (9.21)$$

- Die Abschätzung (9.21) ist unabhängig von der Größe von Λ und gilt auch für $a = b$. Es ergibt sich die Aussage. \square

10 Das zweidimensionale Isingmodell

10.1 Die Stern-Dreiecks-Relation	129
10.2 Die kombinatorische Lösung	131

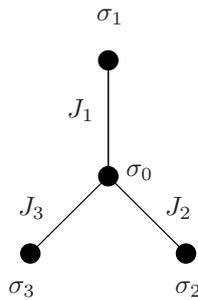
Das zweidimensionale Isingmodell war das erste Modell der Statistischen Mechanik, das einen Phasenübergang besitzt und dessen Freie Energie im thermodynamischen Limes exakt berechnet wurde (Onsager 1944). Dabei wurde ein verschwindendes äußeres Magnetfeld vorausgesetzt. Damit hängt die Freie Energie des Isingmodells nur vom Parameter βJ ab. Da wir ferromagnetische Wechselwirkung annehmen, können wir o.B.d.A. annehmen, dass $J = 1$ ist.

10.1 Die Stern-Dreiecks-Relation

In den letzten Jahrzehnten wurden noch weitere klassische und quantenmechanische Gittermodelle "exakt gelöst" (d. h. die Dichte der Freien Energie berechnet). Manche dieser Modelle (wie das 6-Vertexmodell und das 8-Vertexmodell) hängen dabei von mehr als einem Parameter ab. Zwar wurden verschiedenartige Lösungsmethoden entwickelt, aber es wurde auch klar, dass alle gelösten Modelle sich mit einer einheitlichen Methode angehen lassen, deren Kern die so genannte *Stern-Dreiecksrelation* darstellt. Man spricht in diesem Zusammenhang von *lösbaren* oder *integrablen* Modellen.

Diese Relation und die Grundidee ihrer Anwendung soll hier kurz vorgestellt werden. Wir gehen von vier Spins $\sigma_0, \sigma_1, \sigma_2, \sigma_3 \in E$ aus, die in der Form $-\sum_{i=1}^3 J_i \sigma_i \cdot \sigma_0$ energetisch miteinander verkoppelt seien.

Graphisch können wir diese durch einen Stern mit Mittelpunkt σ_0 und Endpunkten $\sigma_i, i = 1, 2, 3$ darstellen:



Wird in der Zustandssumme über den Spin σ_0 summiert, so ergibt sich

$$\sum_{\sigma_0=\pm 1} e^{+\sum_{i=1}^3 J_i \sigma_i \sigma_0} = 2 \cdot \cosh \left(\sum_{i=1}^3 J_i \sigma_i \right).$$

Diesen Term wollen wir nun als Boltzmannfaktor für eine Energiefunktion interpretieren, die von σ_1, σ_2 und σ_3 abhängt. Da der \cosh eine gerade Funktion seines Argumentes ist, setzen wir eine Energiefunktion an, die gerade bez. der Transformation $(\sigma_1, \sigma_2, \sigma_3) \mapsto (-\sigma_1, -\sigma_2, -\sigma_3)$ ist.

$$H(\sigma_1, \sigma_2, \sigma_3) = -k_0 - k_1 \sigma_2 \sigma_3 - k_2 \sigma_3 \sigma_1 - k_3 \sigma_1 \sigma_2.$$

Wir wollen nun die Gleichungen

$$2 \cosh \left(\sum_{i=1}^3 J_i \sigma_i \right) = e^{-H(\sigma_1, \sigma_2, \sigma_3)} \quad , \quad \sigma_i \in E,$$

nach k_0, k_1, k_2 und k_3 auflösen. Tatsächlich müssen wir wegen der Invarianz unter Spinumklapp nur vier Gleichungen betrachten. Diese können unter Benutzung von hyperbolischen Identitäten in die Form

$$\sinh(2J_i) \cdot \sinh(2k_i) = f(J_1, J_2, J_3) \quad i = 1, 2, 3$$

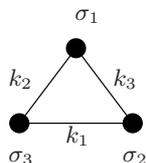
und

$$k_0 = g(J_1, J_2, J_3)$$

gebracht werden, wobei f und g konkrete, in allen Argumenten symmetrische Funktionen sind.

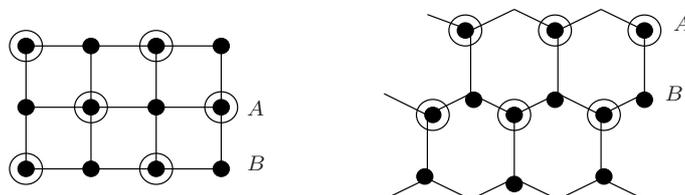
Diese Gleichungen sind nach den k_i auflösbar (auch für verschwindende J_i bei leichter Umstellung). Damit haben wir eine neue Zustandssumme erhalten, in der

der nullte Spin nicht mehr vorkommt. Graphisch entspricht dieser ein Dreieck:



Entscheidend für die Anwendbarkeit der Stern-Dreiecksrelation ist nun, dass üblicherweise in der Statistischen Mechanik betrachtete zweidimensionale Gitter (wie \mathbb{Z}^2 , Honigwabengitter) *bipartit* sind, d. h. in zwei Teilgitter A und B zerfallen, sodass je zwei nächste Nachbarn sich in verschiedenen Teilgittern befinden, z. B.

$$A := \{(k_1, k_2) \in \mathbb{Z}^2 \mid k_1 + k_2 \text{ gerade}\} \quad , \quad B := \mathbb{Z}^2 \setminus A.$$



In der Zustandssumme für Isingmodelle auf diesen Gittern kann damit die Summation über die Spins des B -Gitters ausgeführt werden. Es stellt sich heraus, dass dies ein entscheidender Schritt bei der Diagonalisierung der Transfermatrix ist. Eine gute Referenz zu integrablen Systemen der Statistischen Mechanik ist BAXTER [Bax].

10.2 Die kombinatorische Lösung

Im folgenden werde ich eine ältere, auf Vdovichenko (1964) zurückgehende Lösungsmethode darstellen, die im Buch von LANDAU und LIFSCHITZ [LaLi] vorgeführt wird.²³

Durch Benutzung komplexer Zahlen vereinfacht sich die Notation. Wir verwenden daher statt dem Gitter \mathbb{Z}^2 den Ring

$$V := \mathbb{Z} \oplus i\mathbb{Z} = \{v \in \mathbb{C} \mid \text{Re}(v) \in \mathbb{Z}, \text{Im}(v) \in \mathbb{Z}\}$$

der Gaußschen ganzen Zahlen. Nur die Elemente aus

$$U := \{1, i, -1, -i\} \subseteq V$$

sind invertierbar.

²³Allerdings ist die Darstellung an mehreren Stellen fehlerhaft, wie auch in der Mehrzahl der Originalarbeiten zu diesem Thema.

Für Kantenlänge $L \in \mathbb{N}$ ist

$$V_L := V/LV$$

das periodische Gitter der Kongruenzklassen modulo L , also ein 'diskreter Torus'. Wir werden immer $L \geq 3$ voraussetzen, denn dann werden keine Elemente von U bei der Bildung von Äquivalenzklassen identifiziert. Das Bild von U in V_L bezeichnen wir der Einfachheit halber wieder mit U .

Nun bildet $G_L := (V_L, E_L)$ mit Kantenmenge

$$E_L := \{\{u, v\} \subseteq V_L \mid u - v \in U\}$$

einen Graphen mit $|V_L| = L^2$ Knoten und $|E_L| = 2L^2$ Kanten, den *Nächste-Nachbar-Graphen* von V_L . Da wir wie in Kapitel 8.1 eine Tieftemperaturentwicklung des Isingmodells vornehmen wollen, benutzen wir das verschobene periodische Gitter

$$V_L^* := V_L + \kappa \quad \text{mit} \quad \kappa := \frac{1+i}{2}.$$

Auf die Gitterpunkte setzen wir Spins, wählen also den Konfigurationsraum $\Omega_L := \{-1, 1\}^{V_L^*}$ und die Ising-Energiefunktion

$$H_L : \Omega_L \rightarrow \mathbb{R} \quad , \quad H_L(\sigma) := - \sum_{v \in V_L^*} \sigma(v) \cdot (\sigma(v+1) + \sigma(v+i)).$$

Wir fassen für $\sigma \in \Omega_L$ und Kantenmenge

$$E(\sigma) := \{\{u, v\} \in E_L \mid \sigma(u + \kappa \cdot (v - u)) \neq \sigma(u + \bar{\kappa} \cdot (v - u))\}$$

$(V_L, E(\sigma))$ als denjenigen Graphen auf, der der Spinkonfiguration σ in der Tieftemperaturentwicklung zugeordnet ist.²⁴

Die Kantenmenge $E(\sigma)$ ändert sich beim Umklapp aller Spins ($\sigma(l) \mapsto -\sigma(l)$) nicht. Bezeichnen wir daher mit

$$\Gamma_L := \{E(\sigma) \mid \sigma \in \Omega_L\}$$

die Menge der *erlaubten Graphen* (genauer: Kantenmengen), dann ist

$$|\Gamma_L| = |\Omega_L|/2 = 2^{L^2-1}.$$

Für die Graphen (V_L, γ) mit Kantenmenge $\gamma \in \Gamma_L$ gilt:

²⁴Man beachte dazu, dass für $\{u, v\} \in E_L$ die Punkte $w_1 := u + \kappa \cdot (v - u)$ und $w_2 := u + \bar{\kappa} \cdot (v - u)$ nächste Nachbarn in V_L^* sind, und sich die Kante $\{w_1, w_2\}$ unter Austausch von u und v nicht ändert.

- Der Grad²⁵ $\deg_\gamma(v)$ aller Knoten $v \in V_L$ ist gerade.
- Nennt man Kanten $\{u, v\} \in E_L$ *horizontal*, wenn $u - v \in \{\pm 1\}$ und *vertikal*, wenn $u - v \in \{\pm i\}$ gilt, dann sind in jeder Spalte von (V_L, γ) eine gerade Zahl horizontaler Kanten, und in jeder Zeile von (V_L, γ) eine gerade Zahl vertikaler Kanten enthalten.

Dabei verstehen wir unter der $k \in \mathbb{Z}/L\mathbb{Z}$ -ten *Spalte* von E_L die Menge der (horizontalen) Kanten der Form $\{k + il, k + 1 + il\}$, ($l \in \mathbb{Z}/L\mathbb{Z}$); die k -te *Zeile* wird analog definiert.

Umgekehrt ist jedes $\gamma \subseteq E_L$ mit diesen beiden Eigenschaften in Γ_L , denn wir können durch Vorzeichenwechsel des Spins bei Übertreten von Kanten aus γ konsistent die beiden Konfigurationen σ mit $E(\sigma) = \gamma$ zurückgewinnen.

Für die Zustandssumme

$$Z_L(\beta) := \sum_{\sigma \in \Omega_L} e^{-\beta H_L(\sigma)}$$

des Isingmodells auf V_L bei inverser Temperatur β gilt daher mit $z := e^{-2\beta}$

$$Z_L(\beta) = 2 \cdot e^{2L^2\beta} \sum_{\gamma \in \Gamma_L} z^{|\gamma|}. \quad (10.1)$$

Die nächste Aufgabe besteht darin, die in (10.1) auftretende Summe über Graphen in eine Summe über sog. Schleifenfamilien umzuwandeln.

Unter einer einzelnen Schleife stellen wir uns dabei einen Weg im Graphen $G_L = (V_L, E_L)$ vor, der zum Ausgangspunkt zurückkehrt, bei dem aber nie auf einen Schritt direkt der Schritt in umgekehrter Richtung erfolgt. Eine Schleifenfamilie ist ein k -Tupel solcher Schleifen:

10.1 Definition • Eine **Schleife** der Länge $|s| := N \in \mathbb{N}$ ist eine Abbildung $s : \mathbb{Z}/N\mathbb{Z} \rightarrow V_L$ mit

$$s(n-1) - s(n) \in U \quad \text{und} \quad s(n+1) \neq s(n-1) \quad (n \in \mathbb{Z}/N\mathbb{Z}). \quad (10.2)$$

Die Menge aller Schleifen (beliebiger Länge) bezeichnen wir mit S_L .

- $S_L^\infty := \bigcup_{k \in \mathbb{N}_0} S_L^k$ bezeichnet die Menge aller **Schleifenfamilien**, wobei $S_L^0 := \{\emptyset\}$ gesetzt wird.

Für $s = (s_1, \dots, s_k) \in S_L^k$ ist $|s| := \prod_{i=1}^k |s_i|$ die **Produktlänge** von s , und $|\emptyset| := 1$.

Eine Schleifenfamilie $s \in S_L^k$ besteht aus $N(s) := k$ Schleifen.

²⁵**Def.:** Knoten v_1 und v_2 aus einem Graphen (V, E) heißen *benachbart*, wenn $\{v_1, v_2\} \in E$. $N(v) := \{w \in V \mid \{v, w\} \in E\}$ heißt die *Nachbarschaft* von v . $\deg(v) := |N(v)|$ heißt der *Grad* von v .

- Die **Aktivität** von $s \in S_L^k$ ist $z(s) := e^{-\beta|s|}$.
- Das **Vorzeichen** $U(s) \in \{-1, 1\}$ einer Schleife $s \in S_L$ ist

$$U(s) := \prod_{n \in \mathbb{Z}/|s|\mathbb{Z}} \sqrt{\frac{s(n+1) - s(n)}{s(n) - s(n-1)}}, \quad (10.3)$$

das **Vorzeichen** von $s = (s_1, \dots, s_k) \in S_L^k$ ist

$$U(s) := \prod_{i=1}^k U(s_i) \quad \text{und} \quad U(\emptyset) := 1.$$

- Die **horizontale bzw. vertikale Windungszahl** einer Schleife $s \in S_L$ ist

$$H(s) := \frac{1}{L} \sum_{n \in \mathbb{Z}/|s|\mathbb{Z}} \operatorname{Re}(s(n+1) - s(n)) \in \mathbb{Z}$$

bzw.

$$V(s) := \frac{1}{L} \sum_{n \in \mathbb{Z}/|s|\mathbb{Z}} \operatorname{Im}(s(n+1) - s(n)) \in \mathbb{Z}$$

(hier wird $s(n+1) - s(n)$ als Element von $U \subseteq V$ angesehen).

Für $s = (s_1, \dots, s_k) \in S_L^k$ ist

$$H(s) := \sum_{i=1}^k H(s_i) \quad \text{und} \quad V(s) := \sum_{i=1}^k V(s_i),$$

und $H(\emptyset) := V(\emptyset) := 0$.

- Für $s \in S_L^\infty$ ist

$$F(s) := \frac{1 + (-1)^{H(s)}}{2} \cdot \frac{1 + (-1)^{V(s)}}{2} \in \{0, 1\}.$$

10.2 Beispiel 1. $N = 4$, $s(1) := s(0) + 1$, $s(2) := s(0) + 1 + i$, $s(3) := s(0) + i$. Es wird also ein Quadrat der Kantenlänge 1 umlaufen. s ist eine Schleife mit Vorzeichen $U(s) = -1$.

2. $N = 8$, $U(s) = 1$: Siehe Abb. 10.1.

Offensichtlich können Schleifen Überkreuzungspunkte und doppelt durchlaufene Kanten besitzen. Wie die linke und mittlere Abbildung in 10.1 zeigen, ist das Vorzeichen $U(s)$ nicht einfach aus dem Bild $s(\mathbb{Z}/|s|\mathbb{Z}) \subseteq V_L$ der Schleife ablesbar.

Die entscheidende Identität ist nun:

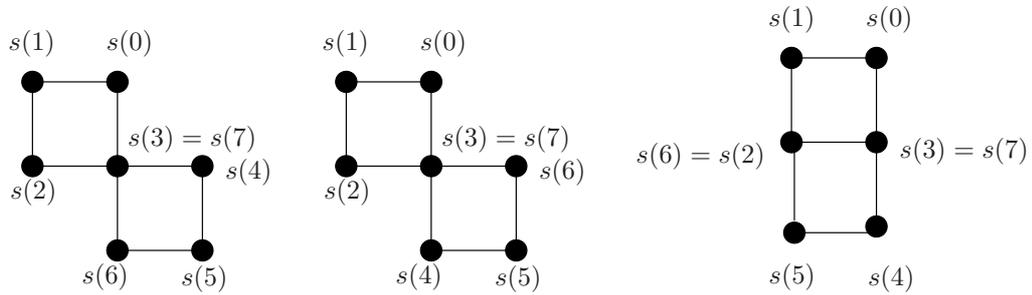


Abbildung 10.1: $N = 8$. Links: $U(s) = 1$, Mitte: $U(s) = -1$, Rechts: $U(s) = 1$

10.3 Satz Für alle $L \geq 3$ gilt

$$\sum_{\gamma \in \Gamma_L} z^{|\gamma|} = \sum_{s \in S_L^\infty} Q(s) \cdot z(s) \quad (10.4)$$

mit

$$Q(s) := \frac{(-1)^{N(s)} \cdot F(s) \cdot U(s)}{N(s)! \cdot 2^{N(s)} \cdot |s|} \quad (s \in S_L^k)$$

(also insbesondere $Q(\emptyset) = 1$).

Bevor wir den Satz beweisen, wollen wir ihn benutzen, um die Freie Energie

$$F(\beta) := \lim_{L \rightarrow \infty} F_L(\beta) \quad \text{mit} \quad F_L(\beta) := -\frac{1}{\beta L^2} \ln(Z_L(\beta))$$

zu berechnen. Wir wissen schon aus Kapitel 6, dass dieser thermodynamische Limes für $\beta \geq 0$ existiert.

10.4 Satz Für $\beta > 0$ ist mit $z = e^{-2\beta}$ die Freie Energie des zweidimensionalen Isingmodells

$$F(\beta) = -\frac{1}{\beta} \ln 2 \quad (10.5)$$

$$-\frac{1}{2\beta} \int_0^{2\pi} \int_0^{2\pi} \frac{d\omega_1}{2\pi} \frac{d\omega_2}{2\pi} \ln \left[(1+z^2)^2 - 2z(1-z^2)(\cos \omega_1 + \cos \omega_2) \right].$$

Bew.: Wir beweisen zunächst die Identität

$$Z_L(\beta) = 2e^{2L^2\beta} \cdot \frac{1}{4} \sum_{h,v \in \{0,1\}} \sqrt{P_L(h,v)} \quad (10.6)$$

für die Zustandssumme, mit

$$P_L(h,v) := \quad (10.7)$$

$$\prod_{p_1, p_2=1}^L \left[(1+z^2)^2 - 2z \cdot (1-z^2) \cdot \left(\cos\left(\frac{2\pi}{L}\left(p_1 - \frac{h}{2}\right)\right) + \cos\left(\frac{2\pi}{L}\left(p_2 - \frac{v}{2}\right)\right) \right) \right].$$

Wegen (10.1) und Satz 10.3 ist (10.6) äquivalent zur Identität

$$\sum_{s \in S_L^\infty} Q(s)z(s) = \frac{1}{4} \sum_{h,v \in \{0,1\}} \sqrt{P_L(h,v)}. \quad (10.8)$$

Nun ist die formale Reihe

$$\begin{aligned} & \sum_{s \in S_L^\infty} Q(s) \cdot z(s) = \\ &= \sum_{s \in S_L^\infty} \frac{(-1)^{N(s)} \cdot \frac{1}{4} \sum_{h,v \in \{0,1\}} (-1)^{h \cdot H(s) + v \cdot V(s)} U(s)}{N(s)! 2^{N(s)} |s|} \cdot z(s) \\ &= \frac{1}{4} \sum_{k=0}^{\infty} \frac{1}{k!} \sum_{s \in S_L^k} \sum_{h,v \in \{0,1\}} \prod_{i=1}^k \left(\frac{-(-1)^{h \cdot H(s_i) + v \cdot V(s_i)} U(s_i)}{2^{|s_i|}} z(s_i) \right) \\ &= \frac{1}{4} \sum_{h,v \in \{0,1\}} \sum_{k=0}^{\infty} \frac{1}{k!} \sum_{\substack{r_1, \dots, r_k=1 \\ |s_i|=r_i}}^{\infty} \sum_{s \in S_L^k} \prod_{i=1}^k \left(\frac{-(-1)^{h \cdot H(s_i) + v \cdot V(s_i)} U(s_i)}{2^{r_i}} z(s_i) \right) \\ &= \frac{1}{4} \sum_{h,v \in \{0,1\}} \sum_{k=0}^{\infty} \frac{1}{k!} \left[-\frac{1}{2} \sum_{r=1}^{\infty} \frac{z^r}{r} \sum_{\substack{s \in S_L \\ |s|=r}} (-1)^{h \cdot H(s) + v \cdot V(s)} U(s) \right]^k \\ &= \frac{1}{4} \sum_{h,v \in \{0,1\}} \sqrt{\tilde{P}_L(h,v)} \end{aligned}$$

mit

$$\tilde{P}_L(h,v) := \exp \left(- \sum_{r=1}^{\infty} \frac{z^r}{r} \sum_{\substack{s \in S_L \\ |s|=r}} (-1)^{h \cdot H(s) + v \cdot V(s)} \cdot U(s) \right). \quad (10.9)$$

Da in der zweiten Summe maximal $4L^2 \cdot 3^r$ Vorzeichen summiert werden, konvergiert der Ausdruck sicher für $|z| < \frac{1}{3}$.

Die in der letzten Formel vorkommende Summe über Schleifen der Länge r wird nun in die Spur einer Matrix umgewandelt. Dazu betrachten wir für $h, v \in \{0,1\}$ die $(4L^2) \times (4L^2)$ -Matrix $A^{h,v} \in \mathcal{M}(V_L \times U, \mathbb{C})$ mit

$$A^{h,v}(q, \nu; q', \nu') := \delta(q, q' + \nu') \cdot (1 - \delta(\nu, -\nu')) \cdot \sqrt{\frac{\nu}{\nu'}} \cdot \gamma^{\operatorname{Re}((h+iv) \cdot \nu')}.$$

Dabei ist $\gamma := \exp(i\pi/L)$. Wir interpretieren nun $q, q' \in V_L$ als aufeinanderfolgende Punkte einer Schleife. Dann

- stellt der Faktor $\delta(q, q' + \nu')$ sicher, dass q Nachbar von q' in ν' -Richtung ist;
- garantiert der Faktor $1 - \delta(\nu, -\nu')$ bei Iteration von $A^{h,v}$, dass die zweite Bedingung in (10.2) erfüllt ist;
- entspricht der Faktor $\sqrt{\nu/\nu'}$ dem in der Definition (10.3) des Vorzeichens $U(s)$,
- während die Potenz der Einheitswurzel γ zum Vorzeichen $(-1)^{h \cdot H(s) + v \cdot V(s)}$ beiträgt.

Es ist daher die Vorzeichensumme für die Schleifen der Länge r

$$\sum_{\substack{s \in S_L \\ |s|=r}} (-1)^{h \cdot H(s) + v \cdot V(s)} \cdot U(s) = \text{tr} \left((A^{h,v})^r \right).$$

Daraus ergibt sich aber durch Einsetzen in (10.9)

$$\begin{aligned} \tilde{P}_L(h, v) &= \exp \left(- \sum_{r=1}^{\infty} \frac{z^r}{r} \text{tr} \left((A^{h,v})^r \right) \right) = \prod_{r=1}^{\infty} \det \left(\exp \left(- \frac{z^r}{r} (A^{h,v})^r \right) \right) \\ &= \det \left(\exp \left(- \sum_{r=1}^{\infty} \frac{(z \cdot A^{h,v})^r}{r} \right) \right) = \det \left(\exp(\ln(\mathbb{1} - zA^{h,v})) \right) \\ &= \det(\mathbb{1} - zA^{h,v}). \end{aligned}$$

Zur Berechnung dieser Determinante konjugieren wir mit der Fouriertransformation (siehe Anhang B)

$$\mathcal{F} : \mathbb{C}^{V_L} \rightarrow \mathbb{C}^{V_L} \quad , \quad (\mathcal{F}f)(p) := \frac{1}{L} \sum_{q \in V_L} f(q) e^{-2\pi i p \cdot q / L}.$$

Unter Ausnutzung der Translationsinvarianz

$$A^{h,v}(q, \nu; q', \nu') = A^{h,v}(0, \nu; q' - q, \nu')$$

erhalten wir die Matrix $\hat{A}^{h,v} := (\mathcal{F} \times \mathbb{1}_U)A^{h,v}(\mathcal{F}^{-1} \times \mathbb{1}_U) \in \mathcal{M}(V_L \times U, \mathbb{C})$ mit

$$\begin{aligned}
& \hat{A}^{h,v}(p, \nu; p', \nu') = \\
& \frac{1}{L^2} \sum_{q, q' \in V_L} \exp\left(-\frac{2\pi i}{L}(p \cdot q - p' \cdot q')\right) \cdot A^{h,v}(q, \nu; q', \nu') \\
& = \frac{1}{L^2} \sum_{q, \hat{q} \in V_L} \exp\left(-\frac{2\pi i}{L}[(p - p') \cdot q - p' \cdot \hat{q}]\right) A^{h,v}(0, \nu; \hat{q}, \nu') \\
& = \delta(p, p') \sum_{\hat{q} \in V_L} \exp\left(\frac{2\pi i}{L}p' \cdot \hat{q}\right) A^{h,v}(0, \nu; \hat{q}, \nu') \\
& = \delta(p, p') \exp\left(-\frac{2\pi i}{L}p \cdot \nu'\right) A^{h,v}(0, \nu; -\nu', \nu').
\end{aligned}$$

Daher ist

$$\det(\mathbb{1} - zA^{h,v}) = \prod_{p \in V_L} \det(\mathbb{1} - z\hat{A}_p^{h,v})$$

mit der 4×4 -Matrix $\hat{A}_p^{h,v} \in \mathcal{M}(U, \mathbb{C})$

$$\hat{A}_p^{h,v}(\nu, \nu') := \exp\left(-\frac{2\pi i}{L}p \cdot \nu'\right) A^{h,v}(0, \nu; -\nu', \nu').$$

Die Indizes $\nu, \nu' \in U$ nehmen die Werte $1, i, -1$ und $-i$ an. Setzen wir daher $\alpha := e^{i\pi/4}$, $\eta := \gamma^{h-2p_1}$ und $\zeta := \gamma^{v-2p_2}$ für $p = \begin{pmatrix} p_1 \\ p_2 \end{pmatrix} \in V_L$, so ist

$$\hat{A}_p^{h,v} = \begin{pmatrix} \eta & \bar{\alpha}\zeta & 0 & \alpha\bar{\zeta} \\ \alpha\eta & \zeta & \bar{\alpha}\bar{\eta} & 0 \\ 0 & \alpha\zeta & \bar{\eta} & \bar{\alpha}\bar{\zeta} \\ \bar{\alpha}\eta & 0 & \alpha\bar{\eta} & \bar{\zeta} \end{pmatrix}$$

und

$$\det(\mathbb{1} - z\hat{A}_p^{h,v}) = R\left(z, \frac{2\pi}{L}(p_1 - \frac{1}{2}h), \frac{2\pi}{L}(p_2 - \frac{1}{2}v)\right)$$

für

$$R(z, \omega_1, \omega_2) := (1 + z^2)^2 - 2z(1 - z^2)(\cos \omega_1 + \cos \omega_2).$$

Wir haben daher die Identität $\tilde{P}_L(h, v) = P_L(h, v)$ für $P_L(h, v)$ aus (10.7) und $\tilde{P}_L(h, v)$ aus (10.9) gezeigt, woraus (10.8) folgt.

Es ist nun $R(z, 0, 0) = (z^2 + 2z - 1)^2 \geq 0$ und

$$R(z, \omega_1, \omega_2) - R(z, 0, 0) = 2z(1 - z^2)(2 - \cos \omega_1 - \cos \omega_2) \geq 0,$$

da $z \in (0, 1)$. Nur für $(z, \omega_1, \omega_2) = (\sqrt{2} - 1, 0, 0)$ ist daher $R(z, \omega_1, \omega_2) = 0$.

Für $z \in (0, 1)$, $z \neq \sqrt{2} - 1$ folgt der thermodynamische Limes $L \rightarrow \infty$ für die Freie Energie (10.5) daher durch Übergang von der Summe zum Integral in

$$F_L(\beta) = -\frac{1}{L^2\beta} \ln(Z_L(\beta)).$$

Der Fall $z = \sqrt{2} - 1$, also $\beta = \beta_{\text{cr}} := \frac{1}{2} \ln(\sqrt{2} + 1)$ ergibt sich aus der Stetigkeit der Freien Energie. \square

- Allgemein wirkt die Gruppe $O := \{-1, 1\} \times \mathbb{Z}$ mit dem semidirekten Produkt²⁶

$$(a, b) \circ (a', b') := (aa', b + ab') \quad ((a, b), (a', b') \in O)$$

durch

$$[(a, b)s](n) := s(an + b) \quad (s \in S_L), \quad (10.10)$$

und dies verallgemeinert sich zu einer Gruppenwirkung des kartesischen Produktes O^k auf S_L^k . Mit dieser Gruppenwirkung verändern wir unabhängig voneinander die Durchlaufrichtungen und Anfangspunkte der Schleifen.

- Andererseits wirkt auf der Menge S_L^k der Familien von k Schleifen auch die Symmetrische Gruppe \mathcal{P}_k von k Objekten durch Permutation. Mit dieser Gruppenwirkung verändern wir die Nummerierung der Schleifen in der Familie.
- Insgesamt erhalten wir damit für $k \in \mathbb{N}$ eine Gruppenwirkung

$$\Psi_k : (\mathcal{P}_k \times O^k) \times S_L^k \rightarrow S_L^k$$

des semidirekten Produktes $\mathcal{P}_k \times O^k$ auf der Menge von Schleifenfamilien der Größe k .

Dann gilt $U(\Psi_k(g, s)) = U(s)$, d. h. das Vorzeichen ist weder vom Startpunkt noch von dem Umlaufsinn abhängig. Ebenso sind Produktlänge $|s|$ (und daher auch die Aktivität $z(s)$), Anzahl $N(s)$ und $F(s)$ invariant unter der Gruppenwirkung. Alle Schleifenfamilien aus dem Orbit

$$\{\Psi_k(g, s) \mid g \in \mathcal{P}_k \times O^k\} \quad (10.11)$$

²⁶**Def.:** Es seien G und H Gruppen und $\varphi : G \rightarrow \text{Aut}(H)$ ein Homomorphismus der ersten Gruppe in die Gruppe der Automorphismen der zweiten Gruppe. Dann heißt die Menge $G \times H$ mit der Gruppenverknüpfung $(g, h) \circ (g', h') := (g \circ g', h \circ \varphi(g)(h'))$ *semidirektes Produkt* von G und H .

sind in diesem Sinn äquivalent und wir werden sie bei Bedarf miteinander identifizieren, wenn wir in (10.4) die Summe über S_L^∞ führen.

Bew. von Satz 10.3: Wir beginnen damit, die *Multiplizität* der Kanten $e \in E_L$ bezüglich einer Schleifenfamilie $s \in S_L^\infty$ zu definieren, also eine Funktion

$$M : S_L^\infty \rightarrow \mathbb{N}_0^{E_L}$$

mit $M(\emptyset)_e := 0$ ($e \in E_L$) und

$$M(s)_e := \sum_{i=1}^k |\{n \in \mathbb{Z} / |s_i| \mathbb{Z} \mid \{s_i(n), s_i(n+1)\} = e\}| \quad (s \equiv (s_1, \dots, s_k) \in S_L^k).$$

Gezeigt werden muss nun dreierlei:

1. Für alle erlaubten Graphen $\gamma \in \Gamma_L$ und

$$\tilde{M}^\gamma \in \mathbb{N}_0^{E_L} \quad \text{mit} \quad \tilde{M}_e^\gamma := \begin{cases} 1 & , e \in \gamma \\ 0 & , e \notin \gamma \end{cases} \quad (e \in E_L)$$

ist

$$\sum_{s \in S_L^\infty : M(s) = \tilde{M}^\gamma} Q(s) = 1. \quad (10.12)$$

2. Für alle nicht erlaubten Graphen $\gamma \subseteq E_L$ mit $\gamma \notin \Gamma_L$ ist

$$\sum_{s \in S_L^\infty : M(s) = \tilde{M}^\gamma} Q(s) = 0.$$

3. Für alle $\hat{M} \in \mathbb{N}_0^{E_L}$ mit $\max_e \hat{M}_e > 1$ ist ebenfalls

$$\sum_{s \in S_L^\infty : M(s) = \hat{M}} Q(s) = 0. \quad (10.13)$$

Am einfachsten ist es, **Behauptung 2** zu zeigen. Denn

- besitzt ein Knoten $v \in V_L$ eines nicht erlaubten Graphen (V_L, γ) ungeraden Grad, dann gibt es keine Schleifenfamilie s mit $M(s) = \tilde{M}^\gamma$, da jede Schleife eine gerade Zahl von Kanten besitzt, die am Knoten v anliegen.
- Besitzt (V_L, γ) in einer Spalte eine ungerade Zahl von horizontalen Kanten, und existiert eine Schleifenfamilie s mit $M(s) = \tilde{M}^\gamma$, dann ist die horizontale Windungszahl $H(s)$ ungerade. Daher ist $F(s) = 0$, also $Q(s) = 0$. Analoges gilt für die Zeilen von (V_L, γ) .

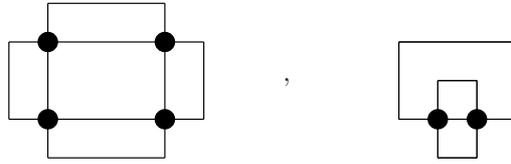


Abbildung 10.2: Zwei Graphen γ und die Mengen $V_4(\gamma)$

Um nun **Behauptung 1** zu beweisen, betrachten wir für einen erlaubten Graphen $\gamma \in \Gamma_L$ die Menge

$$V_4(\gamma) := \{v \in V_L \mid \deg_\gamma(v) = 4\}$$

der Knoten von (V_L, γ) , von denen vier Kanten ausgehen, siehe Abb. 10.2.

Eine Abbildung $\varphi : V_4(\gamma) \rightarrow W$ mit $W := \{\downarrow_r, \uparrow_l, \uparrow\}$ induziert nun in naheliegender Weise eine φ zugeordnete Ψ -Äquivalenzklasse von Schleifenfamilien: Ausgehend von einem Vertex von γ verfolgen wir solange die aufeinanderfolgenden Kanten, bis wir einen Vertex $v \in V_4(\gamma)$ treffen. Dann schlagen wir den durch $\varphi(v)$ symbolisierten Weg ein, siehe Abb. 10.3.

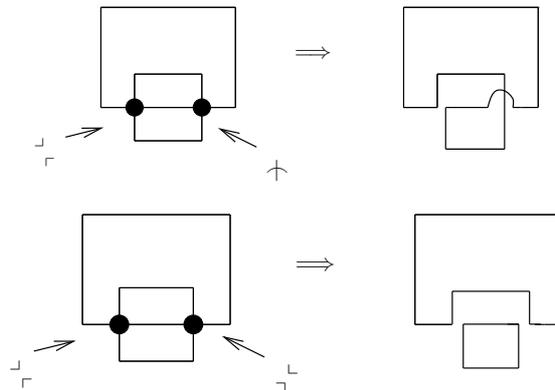


Abbildung 10.3: Unterschiedliche Zerlegungen eines Graphen in Schleifen

Da die Anzahl solcher Abbildungen φ gleich $3^{|V_4(\gamma)|}$ ist, gibt es $3^{|V_4(\gamma)|}$ verschiedene Zerlegungen von γ in Äquivalenzklassen von Schleifenfamilien. Natürlich ist für jede Wahl von φ die Gesamtlänge der resultierenden Schleifen gleich der Zahl der Kanten von γ .

Die Äquivalenzklasse (10.11) der Schleifenfamilie s enthält $N(s)! \cdot 2^{N(s)} \cdot |s|$ Elemente, entsprechend dem Nenner von $Q(s)$.

1. Existieren keine solchen Vierer-Vertices, d. h. $V_4(\gamma) = \emptyset$, so sind wir fertig, denn dann ist sind alle Schleifen s_i der Familie selbstüberkreuzungsfrei, und

haben

- für $H(s_i) = V(s_i) = 0$ Vorzeichen $U(s_i) = -1$. Dieses Vorzeichen kann man durch Schrumpfen der Schleife aus dem des Quadrates (Bsp. 10.2.1) herleiten.
- Ist dagegen $(H(s_i), V(s_i)) \neq (0, 0)$, dann ist $U(s_i) = 1$. Wegen der Voraussetzung $V_4(\gamma) = \emptyset$ gibt es gar keine solche Schleifen in der Familie, oder eine gerade Zahl, mit (betragsmäßig) gleichen horizontalen bzw. vertikalen Umlaufzahlen.

Insgesamt ist also $F(s) = 1$ und $(-1)^{N(s)}U(s) = 1$, woraus sich Behauptung 1 ergibt.

2. Für $V_4(\gamma) \neq \emptyset$ ist die linke Seite in (10.12) gleich

$$\sum_{s \in S_L^\infty : M(s) = \tilde{M}\gamma} Q(s) = \sum_{\varphi: V_4(\gamma) \rightarrow W} \prod_{i=1}^{k(\varphi)} (-1) \cdot U(s_i), \quad (10.14)$$

wobei $(s_1 \dots s_{k(\varphi)})$ eine beliebig gewählte Schleifenfamilie aus der Äquivalenzklasse ist.

Es sei und $V_4(\gamma) = \{v_1, \dots, v_l\}$ eine Nummerierung der $l := |V_4(\gamma)|$ Vierer-Vertices, (10.14) also gleich

$$\sum_{\varphi(v_1) \in W} \cdots \sum_{\varphi(v_l) \in W} \prod_{i=1}^{k(\varphi)} (-1) \cdot U(s_i).$$

Wir wollen diese Summe auf den Fall 1. einer überschneidungsfreien Schleifenfamilie zurückführen, indem wir zeigen, daßs bei fester Wahl von

$$\varphi(v_1), \dots, \varphi(v_{j-1}), \varphi(v_{j+1}), \dots, \varphi(v_l) \in W \quad (10.15)$$

die Terme $\varphi(v_j) = \lrcorner$ und $\varphi(v_j) = \llcorner$ sich gegenseitig aufheben. Dann nämlich bleibt nur der Term mit $\varphi(v_1) = \dots = \varphi(v_l) = \lrcorner$ übrig, und dieser liefert wegen Überschneidungsfreiheit wieder Vorzeichen $+1$.

Nun legt die Wahl (10.15) fest, wie die 4 Nachbarknoten von v_j durch Wege miteinander verbunden sind. Diese Verbindung läßt sich durch ein Symbol $w \in W = \{\lrcorner, \lrcorner, \llcorner, \llcorner\}$ beschreiben. Es können zwei Fälle auftreten:

- $w = \lrcorner$. Dann sind für $\varphi(v_j) = \lrcorner$ und $\varphi(v_j) = \llcorner$ die Zahlen $N(s)$ einander gleich, aber das Vorzeichen $U(s)$ unterscheidet sich.
- $w \in \{\lrcorner, \llcorner\}$. Dann sind für $\varphi(v_j) = \lrcorner$ und $\varphi(v_j) = \llcorner$ die Zahlen

$N(s)$ um eins verschieden, aber die Vorzeichen $U(s)$ sind gleich.

In beiden Fällen sind damit wie behauptet die Vorzeichen von $Q(s)$ für $\varphi(v_j) = \neg^{\perp}$ und $\varphi(v_j) = \neg^{\uparrow}$ unterschiedlich.

Behauptung 3 soll zunächst an einem Beispiel illustriert werden:

10.5 Beispiel Die linke Schleifenfamilie in Abb. 10.4 besteht nur aus einer Schleife s der Länge $|s| = 8$, und des Vorzeichens $U(s) = 1$ (siehe auch Abb. 10.1, rechts). Es ist also $Q(s) = -1/16$. Andererseits liefert die Gruppenaktion (10.10) $2N = 16$ voneinander verschiedene zu s äquivalente Schleifen, sodass der Beitrag dieser Äquivalenzklasse -1 ist.

Die mittlere Schleifenfamilie $s = (s_1, s_2)$ in Abb. 10.4 besteht aus zwei Schleifen der Längen 4 (also je 8 Wahlmöglichkeiten für Startpunkt und Umlaufsinn) und mit den Vorzeichen $U(s_1) = U(s_2) = -1$. Damit ist $Q(s) = +1/(2 \times 8 \times 8)$. Andererseits liefert die Permutation von s_1 und s_2 zusammen mit den Gruppenaktionen (10.10) auf s_1 und s_2 insgesamt $2 \times 8 \times 8 = 128$ Schleifenfamilien. Diese Äquivalenzklasse trägt damit $+1$ bei. Die beiden Äquivalenzklassen sind also betragsmäßig gleich, besitzen aber unterschiedliche Vorzeichen, heben sich also in der Summe auf.

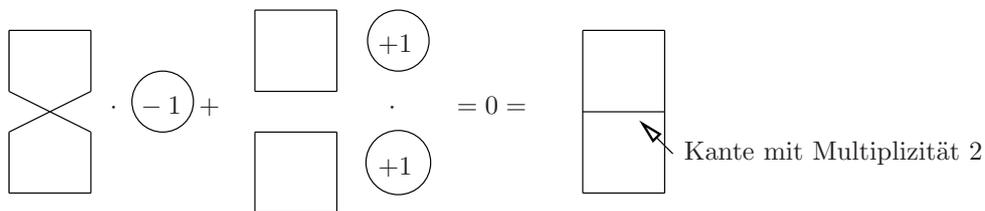


Abbildung 10.4: Zwei sich aufhebende Äquivalenzklassen von Schleifenfamilien

Wie in diesem Beispiel beruht der allgemeine Beweis der Behauptung 3 auf einer Permutation der zu (10.13) beitragenden Schleifenfamilien an einer mehrfach durchlaufenen Kante. Das Signum der Permutation überträgt sich dabei auf das relative Vorzeichen der Familien.

Eine ausführlichere mathematisch rigorose Darstellung findet man in der unveröffentlichten Diplomarbeit von P. Wolz ²⁷. □

Das Argument des Logarithmus in der Formel (10.5) für die Freie Energie ist nichtnegativ, denn wegen $z \in (0, 1)$ und $\cos(x) \leq 1$ ist es größer als

$$(1 + z^2)^2 - 2z(1 - z^2) = (-1 + 2z + z^2)^2 \geq 0.$$

²⁷ P. Wolz: Das zweidimensionale Ising-Modell nach Vdovichenko. Diplomarbeit, Freie Universität Berlin, FB Physik 1996

Die Nullstelle tritt bei $z_{\text{cr}} := \sqrt{2} - 1$, also $\beta_{\text{cr}} = -\frac{1}{2} \ln(\sqrt{2} - 1) = \frac{1}{2} \ln(\sqrt{2} + 1)$ auf.

Mit anderen Worten besitzt das zweidimensionale Isingmodell für $\beta \neq \beta_{\text{cr}}$ keinen Phasenübergang, während die Analytizität der Freien Energie bei β_{cr} dadurch gebrochen wird, dass für $\omega_1 = \omega_2 = 0$ das Argument des Logarithmus Null wird.

Um die Natur dieses Phasenübergangs zu verstehen, entwickeln wir das Argument des Logarithmus bis zur zweiten Ordnung in den Variablen $\Delta\beta = \beta - \beta_{\text{cr}}$, ω_1 und ω_2 .

Wir erhalten

$$c_1 \Delta\beta^2 + c_2(\omega_1^2 + \omega_2^2)$$

und schließen aus der Symmetrie in $\Delta\beta \mapsto -\Delta\beta$, dass die erste Ableitung von $F(\beta)$ noch stetig ist.

Damit ist aber auch der Erwartungswert der inneren Energie am kritischen Punkt stetig. Das System besitzt keine latente Wärme und der Phasenübergang ist nicht erster Ordnung. Er ist aber zweiter Ordnung, denn die zweite Ableitung von F (und damit die Wärmekapazität) divergiert wie $c \cdot |\ln(|\Delta\beta|)|$.

In ähnlicher Weise lässt sich die spontane Magnetisierung $m(\beta)$ errechnen und es ergibt sich mit der Abkürzung $x := \tanh \beta$

$$m(\beta) = \begin{cases} 0 & , \beta < \beta_{\text{cr}} \\ \pm \left(1 - \left(\frac{x^{-1} - x}{2} \right)^4 \right)^{1/8} & , \beta \geq \beta_{\text{cr}} \end{cases}$$

siehe Abb. 10.5.

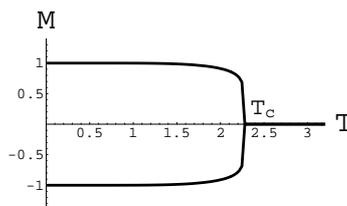


Abbildung 10.5: Spontane Magnetisierung des zweidimensionalen Isingmodells

11 Der thermodynamische Limes in der Quantenmechanik

Im Kapitel 6 hatten wir gesehen, dass der thermodynamische Limes der Freien Energie nicht nur für klassische, sondern auch für quantenmechanische Spin-

systeme mit einer translationsinvarianten Wechselwirkung endlicher Reichweite existiert.

Daher können wir auch in der Quantenmechanik untersuchen, ob die Freie Energie analytisch von Parametern wie der Temperatur abhängt oder nicht. Die Punkte der Nichtanalytizität im Parameterraum heißen Phasenübergangspunkte, wie im klassischen Fall.

Für klassische Spinsysteme hatten wir aber noch einen zweiten Aspekt von Phasenübergängen kennen gelernt, nämlich die Existenz verschiedener asymptotischer Gibbsmaße für einen Parameterwert. Nun entsprechen die Zustände der klassischen Statistischen Mechanik Wahrscheinlichkeitsmaßen auf dem Raum der Konfigurationen.

Es liegt daher nahe, in der Quantenmechanik Phasenübergänge mit der Existenz verschiedener Zustände zu gegebenem Parameter in Verbindung zu bringen. Allerdings ist nicht klar, welche Bedingungen diese Zustände des unendlichen quantenmechanischen Spinsystems erfüllen sollen.

Im klassischen Fall hatten wir asymptotische Gibbsmaße dadurch definiert, dass wir ihre bedingten Wahrscheinlichkeiten (bez. Randbedingungen) festgelegt hatten.

Diese Möglichkeit besteht in der Quantenmechanik nicht mehr, da diese (im Fall nicht kommutierender Operatoren) keine wahrscheinlichkeitstheoretische Interpretation erlaubt.

Interessanterweise können wir uns aber eine andere Struktur zunutze machen, die bei quantenmechanischen im Gegensatz zu klassischen Spinsystemen existiert: Die Zeitevolution.

Betrachten wir zunächst endliche Spinsysteme mit N Spins. Klassisch ist der Konfigurationsraum $\Omega = E^N$ und die Energiefunktion $H : \Omega \rightarrow \mathbb{R}$ definiert keine Bewegung der Spins (deswegen hatten wir sie ja auch nicht Hamiltonfunktion genannt).

Quantenmechanisch betrachten wir den Hilbertraum $\mathcal{H} = \bigotimes_{i=1}^N \mathbb{C}^2$ und einen selbstadjungierten Operator $H \in B(\mathcal{H})$, den Hamiltonoperator. Dieser erzeugt die einparametrische Familie

$$U(t) := \exp(-iHt) \quad , \quad t \in \mathbb{R}$$

unitärer Operatoren, die *Zeitevolution* auf \mathcal{H} .

Auffallend ist die Ähnlichkeit dieser Definition mit der des *Temperaturzustandes* $\Phi_\beta : B(\mathcal{H}) \rightarrow \mathbb{C}$ zur inversen Temperatur $\beta \geq 0$ mit Dichtematrix

$$\rho(\beta) := \frac{\exp(-\beta H)}{\text{tr}(\exp(-\beta H))} \quad , \quad \Phi_\beta(O) = \text{tr}(\rho(\beta) \cdot O)$$

aus Kapitel 3. Dies führt zur so genannten KMS-Eigenschaft des Temperaturzustandes. KMS steht dabei für Kubo, Martin und Schwinger, siehe SEWELL [Se]

und THIRRING [Th].

Die Zeitevolution $U(-t)AU(t)$ eines Operators $A \in B(\mathcal{H})$ sei mit A_t bezeichnet, wobei auch komplexe t zugelassen sind. Damit für den zeitevolvierten Zustand Φ^t mit $\Phi^t(A) := \text{tr}(\sigma_t A)$ gilt: $\Phi^t(A) = \Phi^0(A_t)$, muss sich die Dichtematrix σ gemäß $\sigma_t := U(t)\sigma U(-t)$ entwickeln.

11.1 Satz *Der Temperaturzustand Φ_β ist der einzige Zustand auf $B(\mathcal{H})$, für den die KMS-Eigenschaft*

$$\Phi_\beta(A_t B) = \Phi_\beta(B A_{t+i\beta}) \quad \text{für alle } A, B \in B(\mathcal{H}) \quad , \quad t \in \mathbb{R}$$

gilt.

Bew.:

- Zunächst ist jeder Zustand Φ auf dem endlich-dimensionalen Hilbertraum normal, besitzt also eine Dichtematrix σ . Allgemein gilt daher

$$\Phi(A_t B) = \text{tr}(\sigma A_t B) = \text{tr}(\sigma_{-i\beta} A_{t+i\beta} B_{i\beta}) = \text{tr}(B_{i\beta} \sigma_{-i\beta} A_{t+i\beta}), \quad (11.1)$$

denn wir können zwischen die Operatoren Terme der Form $U(i\beta) \cdot U(-i\beta)$ einschließen und unter der Spur zyklisch vertauschen.

- Speziell für $\sigma := \rho \equiv \rho(\beta) = \frac{1}{Z} U(-i\beta)$ (mit $Z = \text{tr}(e^{-\beta H})$) gilt aber

$$\begin{aligned} & \text{tr}(B_{i\beta} \sigma_{-i\beta} A_{t+i\beta}) \\ &= \text{tr} \left(U(-i\beta) B U(i\beta) \left(U(-i\beta) \frac{U(-i\beta)}{Z} U(i\beta) \right) A_{t+i\beta} \right) \\ &= \text{tr} \left(\frac{U(-i\beta)}{Z} B A_{t+i\beta} \right) = \Phi_\beta(B A_{t+i\beta}), \end{aligned}$$

sodass der Temperaturzustand die KMS-Bedingung erfüllt.

- Erfüllt umgekehrt ein Zustand Φ mit Dichtematrix σ die KMS-Bedingung, so muss zunächst σ mit $\rho \equiv \rho(\beta)$ vertauschen. Setzen wir nämlich $B := \mathbb{1}$ und $t := 0$, so ergibt sich

$$\text{tr}(\sigma A) = \text{tr}(\sigma A_{i\beta}) \quad \text{für alle } A \in B(\mathcal{H}),$$

woraus

$$\text{tr}(\sigma A) = \text{tr}(U(i\beta) \sigma U(-i\beta) A)$$

bzw.

$$\text{tr}([\sigma, U(-i\beta)] \cdot A') = 0$$

mit $A' := AU(i\beta)$ folgt. Da A (und damit A') frei wählbar ist, muss $[\sigma, U(-i\beta)] = 0$ sein, also wegen $\rho = \frac{U(-i\beta)}{Z}$ auch $[\sigma, \rho] = 0$.

Außerdem folgt aus (11.1) mit $[\sigma, U(-i\beta)] = 0$

$$\begin{aligned}\mathrm{tr}(\sigma AB) &= \mathrm{tr}(B_{i\beta}\sigma_{-i\beta}A_{i\beta}) = \mathrm{tr}(B_{i\beta}\sigma A_{i\beta}) \\ &= \mathrm{tr}(U(-i\beta)BU(i\beta)\sigma A_{i\beta}) \\ &= \mathrm{tr}(\sigma BA_{i\beta}) + \mathrm{tr}([U(-i\beta)B, U(i\beta)\sigma]A_{i\beta}),\end{aligned}$$

sodass der zweite Summand verschwindet, wenn die KMS-Bedingung für σ erfüllt ist. Da wir A (und damit $A_{i\beta}$!) frei wählen können, muss also

$$[U(-i\beta)B, U(i\beta)\sigma] = 0$$

sein. Äquivalent muss für alle $C \in B(\mathcal{H})$ gelten, dass $[C, U(i\beta)\sigma] = 0$ ist.

Daher ist $U(i\beta)\sigma = \lambda \mathbb{1}$ mit $\lambda \in \mathbb{C}$ geeignet bzw. $\sigma = \lambda U(-i\beta) = \lambda \cdot Z \cdot \rho(\beta)$.

Mit $\mathrm{tr}(\sigma) \stackrel{!}{=} 1$ folgt $\sigma = \rho(\beta)$. \square

11.2 Bemerkung Analoges lässt sich für ein quantenmechanisches System von N Teilchen zeigen, wenn $e^{-\beta H}$ ein Spurklasseoperator ist. Physikalisch bedeutet die letzte Bedingung in etwa, dass die Teilchen nicht nach unendlich entweichen können.

Während aber im Fall quantenmechanischer Spins die Funktion $t \mapsto \Phi_\beta(A_t B)$ eine in $t \in \mathbb{C}$ ganz-analytische Funktion ist, gilt dies im allgemeinen Fall von N Teilchen nicht mehr. Dort ist H immer noch von unten beschränkt, d. h. $H \geq C \cdot \mathbb{1}$ mit $C \in \mathbb{R}$ geeignet (denn sonst könnte $e^{-\beta H}$ kein Spurklasseoperator sein). Im Allgemeinen ist aber H nicht nach oben beschränkt (Beispiel: Harmonischer Oszillator). Daher ist die Abbildung

$$t \mapsto \Phi_\beta(A_t B) = \frac{1}{Z} \mathrm{tr} \left(e^{-(\beta + \mathrm{Im}(t))H} \cdot A_{\mathrm{Re}(t)} e^{\mathrm{Im}(t)H} B \right)$$

nur noch im Streifen $-\beta < \mathrm{Im}(t) < 0$ analytisch.

Entsprechend ist die Abbildung

$$t \mapsto \Phi_\beta(B A_t) = \frac{1}{Z} \mathrm{tr} \left(B e^{-\mathrm{Im}(t) \cdot H} A_{\mathrm{Re}(Z)} e^{-(\beta - \mathrm{Im}(t)) \cdot H} \right)$$

nur im Streifen $0 < \mathrm{Im}(t) < \beta$ analytisch.

Unser Ziel war die Charakterisierung von quantenmechanischen Temperaturzuständen im thermodynamischen Limes. Dort verliert die Dichtematrix $\frac{e^{-\beta H}}{\mathrm{tr}(e^{-\beta H})}$ ihren Sinn, aber (unter günstigen Umständen) ist immer noch die Zeitevolution $t \mapsto a_t$, $t \in \mathbb{R}$ einer Observablen a definiert. Wir fordern nun auch für die unendlichen Temperaturzustände die oben gezeigten Eigenschaften der N -Teilchenzustände:

11.3 Definition Sei eine C^* -Algebra \mathcal{A} von Observablen und ein stetiger Zeitautomorphismus $A \mapsto A_t$ für $A \in \mathcal{A}$, $t \in \mathbb{R}$ gegeben. Ein Zustand $\Phi : \mathcal{A} \rightarrow \mathbb{C}$ heißt **KMS-Zustand** bez. der inversen Temperatur $\beta > 0$, wenn sich für $A, B \in \mathcal{A}$ die Abbildungen $t \mapsto \Phi(A_t B)$ bzw. $t \mapsto \Phi(B A_t)$ in den Streifen $-\beta < \text{Im}(t) < 0$ bzw. $0 < \text{Im}(t) < \beta$ analytisch fortsetzen lassen, in den abgeschlossenen Streifen stetig sind und dort der Bedingung

$$\Phi(A_t B) = \Phi(B A_{t+i\beta}) \quad (-\beta \leq \text{Im}(t) \leq 0),$$

genügen.

11.4 Bemerkungen 1. Wählen wir als C^* -Algebra $\mathcal{A} := B(\mathcal{H})$ für den Hilbertraum \mathcal{H} des N -Spin-Systems, so muss, wie wir gezeigt haben, $\Phi = \Phi_\beta$ sein.

Im Fall unendlich vieler Spins charakterisiert aber, ähnlich wie im klassischen Fall, die KMS-Bedingung den Zustand im Allgemeinen nicht eindeutig. Es können also zu gegebenem $\beta > 0$ verschiedene KMS-Zustände existieren. Das ist dann eine Phasenkoexistenz.

2. Im klassischen Fall konnten wir die asymptotischen Gibbsmaße auf dem ganzen Gitter durch Limesbildung über Maße erhalten, die jeweils nur endlich viele Spins einbezogen. Das ist natürlich für Anwendungen sehr wichtig und wir haben diese Tatsache z. B. im Kapitel 8.1 über das Peierlsargument benutzt. Ähnliches ist auch im Fall der KMS-Zustände möglich.

Die Konstruktionen sind in BRATTELI und ROBINSON [BR], Band II beschrieben, gehen aber über den mathematischen Rahmen dieser Vorlesung hinaus.

Der Zusammenhang von KMS- und DLR-Bedingung wird in [Is] diskutiert; siehe auch [Ar].

Abschließend möchte ich kurz einiges über in quantenmechanischen Modellen auftretende Phasenübergänge sagen.

In Kapitel 4 war gezeigt worden, dass klassische Spinsysteme als Spezialfall quantenmechanischer Spinsysteme aufgefasst werden können. Dies ist auch konzeptionell nützlich, erklärt es doch die Diskretheit der Spin-Konfiguration.

In der Konstruktion von Kapitel 4 war eine Energiefunktion

$$H(\omega) = - \sum_{\Lambda \subseteq \{1, \dots, N\}} J(\Lambda) \omega_\Lambda \quad (\omega \in E^N)$$

von N klassischen Spins durch den Hamiltonoperator

$$H_{\text{op}} = - \sum_{\Lambda \subseteq \{1, \dots, N\}} J(\Lambda) \cdot \prod_{i \in \Lambda} \sigma_i^3 \quad (11.2)$$

mit $\sigma_i^3 = \mathbb{1} \otimes \dots \otimes \mathbb{1} \otimes \underbrace{\sigma^3}_{i\text{-te Stelle}} \otimes \mathbb{1} \otimes \dots \otimes \mathbb{1}$ und $\sigma^3 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$ ersetzt worden.

Insbesondere können wir die Ising-Modelle auch als quantenmechanische Spinsysteme auffassen, sodass wir Beispiele quantenmechanischer Systeme mit ($d \geq 2$) bzw. ohne ($d = 1$) Phasenübergang gratis bekommen.

Allerdings sind diese Systeme nicht sehr typisch, denn alle Summanden des Operators (11.2) vertauschen.

Typischer ist das *isotrope Heisenberg-Modell* mit Hamiltonoperator

$$H_{\text{Heisenberg}} := -J \sum_{\langle i,j \rangle} \sum_{k=1}^3 \sigma_i^k \cdot \sigma_j^k,$$

Nächste Nachbarn

bei denen über alle Paulischen Spinmatrizen summiert wird. Da diese nicht vertauschen, treten quantenmechanische Effekte auf. Wie in einer Übungsaufgabe gezeigt werden sollte, ist der Raum der reinen Zustände eines einzelnen Spins isomorph zur Kugeloberfläche S^2 (entsprechend den Raumrichtungen). Die Spinausrichtungen können sich kontinuierlich ändern, sodass auch das zweidimensionale Heisenbergmodell bei tiefen Temperaturen keine spontane Magnetisierung zeigt (Mermin-Wagner-Theorem).

Allerdings tritt für \mathbb{Z}^d , $d \geq 3$ spontane Magnetisierung auf (siehe RUELLE [Ru], Kap. 5.5).

12 Andere Anwendungen des Thermodynamischen Formalismus

12.1 Iterierte Abbildungen	150
12.2 Streuung an drei Scheiben	154

In dieser Vorlesung wurde der Formalismus von Gleichgewichtszuständen der Statistischen Mechanik vorgestellt. Physikalisch ging es um die Beschreibung statistischer Eigenschaften einer großen Zahl von Teilchen. Mathematisch gesehen ist die *klassische* Statistische Mechanik ein Teilgebiet der Wahrscheinlichkeitstheorie, dessen Entwicklung jedoch durch außermathematische Fragestellungen - wie die nach der Natur der Phasenübergänge - vorangetrieben wurde.

Es hat sich herausgestellt, dass der *Formalismus* der Statistischen Mechanik (Gibbsmaß, Freie Energie, Wechselwirkungspotential etc.) in ganz anderen mathematischen Disziplinen, wie z. B. den Dynamischen Systemen oder der Zah-

lentheorie²⁸, angewandt werden kann.

12.1 Definition Ein Dynamisches System ist eine stetige Abbildung

$$\Phi : G \times P \rightarrow P,$$

wobei G die (topologische) Gruppe \mathbb{R} oder \mathbb{Z} bzw. das Monoid \mathbb{R}^+ oder \mathbb{N}_0 bezeichnet und P ein topologischer Raum ist, und für die Familie von **Zeit t -Abbildungen**

$$\Phi_t : P \rightarrow P \quad , \quad \Phi_t(m) := \Phi(t, m) \quad (t \in G)$$

$$\Phi_0 = \text{Id}_P \quad \text{und} \quad \Phi_{t_2} \circ \Phi_{t_1} = \Phi_{t_1+t_2} \quad (t_1, t_2 \in G)$$

gilt. P heißt **Phasenraum**. Im Fall $G = \mathbb{R}$ heißt Φ auch **Fluss**.

Das erste der beiden nachfolgenden Beispiele entstammt der Theorie iterierter Abbildungen, das zweite der klassischen Streutheorie.

Empfehlenswerte Bücher zu Anwendungen des Thermodynamischen Formalismus sind FALCONER [Fa] und KELLER [Ke].

12.1 Iterierte Abbildungen

Es seien X_0 und X_1 zwei disjunkte Intervalle in $X := [0, 1]$ und

$$f : X_0 \cup X_1 \rightarrow X$$

glatt mit Ableitung $\inf_x |f'(x)| > 1$ und der Eigenschaft, dass X_0 und X_1 jeweils bijektiv auf X abgebildet werden.

12.2 Beispiel Wir können etwa für $a > 2$ die Intervalle

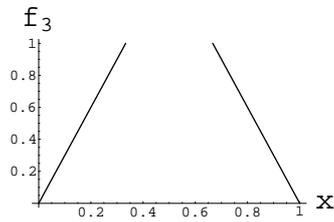
$$X_0 := [0, 1/a] \quad , \quad X_1 := [1 - 1/a, 1]$$

und die Abbildung

$$f_a(x) := \begin{cases} ax & , \quad x \in X_0 \\ a(1-x) & , \quad x \in X_1 \end{cases}$$

benutzen. Diese besitzt also die Ableitung $|f'_a(x)| = a$.

²⁸Für eine Anwendung des Thermodynamischen Formalismus in der Theorie der Primzahlen, genauer gesagt der Riemannsches Zetafunktion, siehe: A. Knauf: Number Theory, Dynamical Systems and Statistical Mechanics. Reviews in Mathematical Physics **11**, 1027–1060 (1999)



Betrachten wir die Umkehrabbildungen

$$g_i : X \rightarrow X_i \quad , \quad g_i(x) := f^{-1}(x) \cap X_i \quad (i = 0, 1),$$

dann sind g_0 und g_1 bijektiv.

Wir setzen für $\mathbf{i} = (i_1, \dots, i_k) \in I_k := \{0, 1\}^k$

$$g_{\mathbf{i}} := g_{i_1} \circ \dots \circ g_{i_k} \quad \text{und} \quad X_{\mathbf{i}} := g_{\mathbf{i}}(X). \quad (12.1)$$

Dann ist auch $g_{\mathbf{i}}$ injektiv, und

$$X_{\mathbf{i}} \supset X_{\mathbf{i},0} \dot{\cup} X_{\mathbf{i},1} \quad (\mathbf{i} \in I_k). \quad (12.2)$$

Nach k Rückwärtsiterationen haben wir also 2^k disjunkte Intervalle und wir bezeichnen ihre disjunkte Vereinigung mit

$$E_k := \bigcup_{\mathbf{i} \in I_k} X_{\mathbf{i}} \quad (k \in \mathbb{N}),$$

$E_0 := X$. Wegen (12.2) gilt $E_{k+1} \subseteq E_k$. Uns interessiert die Limesmenge

$$E := \bigcap_{k \in \mathbb{N}} E_k.$$

Im Fall der Abbildung f_a und $a = 3$ ist das die klassische Cantormenge, die im Limes entsteht, wenn man das mittlere Drittel aus dem Intervall $[0, 1]$ entfernt und gleiches immer wieder für die Teilintervalle tut.

In jedem Fall erhalten wir mit

$$\Phi_0 := \text{Id}_E \quad , \quad \Phi_{t+1} := f \circ \Phi_t$$

ein dynamisches System auf dem Phasenraum E mit Monoid \mathbb{N}_0 .

Wir setzen nun für eine beliebige Lipschitz-stetige Funktion $\phi : X_0 \cup X_1 \rightarrow \mathbb{R}$

$$S_k \phi(x) := \sum_{l=0}^{k-1} \phi(f^l(x)) \quad (k \in \mathbb{N}, x \in E_{k-1}).$$

Dann lässt sich zeigen (siehe [Fa] und WALTERS [Wa]):

12.3 Satz Ist für alle k und $\mathbf{i} \in I_k$ $x_{\mathbf{i}} \in X_{\mathbf{i}}$, dann existiert der sog. **topologische Druck**

$$P(\phi) := \lim_{k \rightarrow \infty} \frac{1}{k} \ln \left(\sum_{\mathbf{i} \in I_k} \exp(S_k \phi(x_{\mathbf{i}})) \right)$$

und ist unabhängig von der Wahl der Punkte $x_{\mathbf{i}}$.

$P(\phi)$ besitzt eine formale Ähnlichkeit mit der Freien Energie in der statistischen Mechanik, wenn man den Limes $k \rightarrow \infty$ als thermodynamischen Limes versteht, und $S_k \phi(x_{\mathbf{i}})$ als Energie der Konfiguration $\mathbf{i} \in \{0, 1\}^k$.

Wir wollen nun den topologischen Druck benutzen, um die Hausdorff-Dimension von E bestimmen. Zunächst die Definition dieser fraktalen Dimension:

12.4 Definition • Eine endliche oder abzählbare Familie $\{U_j\}_{j \in J}$ von Teilmengen $U_j \subseteq \mathbb{R}^n$ heißt δ -Überdeckung einer Menge $E \subseteq \mathbb{R}^n$, wenn die Durchmesser $|U_j| \leq \delta$ sind und $E \subseteq \bigcup_{j \in J} U_j$.

- Für $s \geq 0$ sei

$$\mathcal{H}_\delta^s(E) := \inf \left\{ \sum_{j \in J} |U_j|^s \mid \{U_j\}_{j \in J} \text{ ist } \delta\text{-Überdeckung von } E \right\}.$$

- Dann heißt

$$\mathcal{H}^s(E) := \lim_{\delta \searrow 0} \mathcal{H}_\delta^s(E)$$

das δ -dimensionale **Hausdorffmaß** von E .

- Die **Hausdorff-Dimension** von E ist

$$\dim_H(E) := \inf \{s > 0 \mid \mathcal{H}^s(E) = 0\}.$$

Dazu setzen wir $\phi(x) := -s \ln |f'(x)|$.

12.5 Lemma $s \mapsto P(-s \ln(|f'|))$ ist stetig, streng monoton fallend, $P(0) = \ln 2$ und $\lim_{s \rightarrow \infty} P(s) = -\infty$.

Bew.:

Setze $m_i := \inf_{x \in X_0 \cup X_1} \ln |f'(x)|$ und $m_s := \sup_{x \in X_0 \cup X_1} \ln |f'(x)|$. Dann ist für alle $\delta > 0$

$$\begin{aligned} & P(-(s + \delta) \ln |f'|) - P(-s \ln |f'|) \\ &= \lim_{k \rightarrow \infty} \frac{1}{k} \ln \left(\frac{\sum_{\mathbf{i} \in I_k} \exp \left(-(s + \delta) \sum_{l=0}^{k-1} |f'(f^l(x_{\mathbf{i}}))| \right)}{\sum_{\mathbf{i} \in I_k} \exp \left(-s \sum_{l=0}^{k-1} |f'(f^l(x_{\mathbf{i}}))| \right)} \right) \\ &\leq \lim_{k \rightarrow \infty} \frac{1}{k} \ln (\exp(-\delta k m_i)) = -\delta m_i < 0 \end{aligned}$$

und analog $P(-(s + \delta) \ln |f'|) - P(-s \ln |f'|) \geq -\delta m_s > -\infty$. Daraus ergibt sich Stetigkeit, strenge Monotonie und Limesverhalten. \square

12.6 Satz Sei s die eindeutige Zahl mit

$$P(-s \ln |f'|) = 0.$$

Dann ist $\dim_H(E) = s$.

Bew.: Die Eindeutigkeit von s ergibt sich aus Lemma 12.5. Wir können E durch die Intervalle X_i von E_k überdecken. Deren Länge ist nach (12.1) und dem Mittelwertsatz der Integralrechnung für ein geeignetes (i -abhängiges) $y \in X$ gleich

$$|X_i| = |g_i(X)| = \left| \int_0^1 g'_i(z) dz \right| = |g'_i(y)|.$$

Wir schreiben $y = f^k(x_i)$ mit $x_i \in X_i$. Dann ist $g_{i_{l+1}, \dots, i_k}(y) = f^l(x_i)$. Da die Ableitung der k -ten iterierten

$$|X_i| = |g'_i(y)| = \prod_{l=1}^k |g'_{i_l}(g_{i_{l+1}, \dots, i_k}(y))| = \prod_{l=1}^k |g'_{i_l}(f^l(x_i))| = \prod_{l=0}^{k-1} |f'(f^l(x_i))|^{-1}$$

die Kontraktionsrate ist, gilt

$$|X_i|^s = \exp \left(s \cdot \ln \left| \frac{d}{dy} g_i(y) \right| \right) = \exp \left(-s \sum_{l=0}^{k-1} \ln |f'(f^l(x_i))| \right).$$

Wir erhalten so

$$\mathcal{H}^s(E) \leq \sum_{i \in I_k} |X_i|^s = \sum_{i \in I_k} \exp(S_k \phi(x_i)).$$

Vergleich mit $P(-s \ln(|f'|))$ liefert $\dim_H(E) \leq s$. Eine weitergehende Überlegung (siehe [Fa], Theorem 5.3) ergibt die umgekehrte Ungleichung. \square

Bsp.: Für f_a ist $-s \ln(|f'_a|) = -s \ln(a)$, also $S_k \phi = -ks \ln(a)$, also

$$\frac{1}{k} \ln \left(\sum_{i \in I_k} \exp(S_k \phi(x_i)) \right) = \frac{1}{k} \ln (2^k e^{-aks}) = \ln 2 - s \ln a.$$

Damit wird

$$\dim_H(E) = \frac{\ln 2}{\ln a} < 1.$$

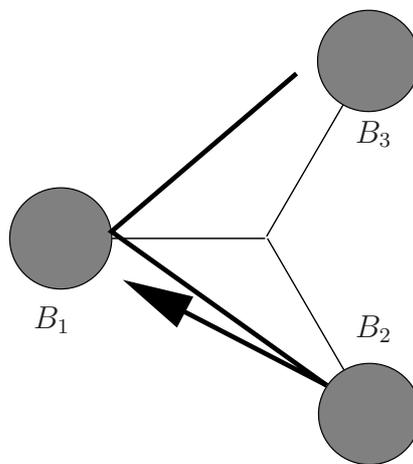
Speziell für die Cantormenge, also $a = 3$ erhalten wir die Hausdorff-Dimension

$$\dim_H(E) = \frac{\ln 2}{\ln 3} \approx 0.63.$$

12.2 Streuung an drei Scheiben

Wir betrachten die Bewegung eines Teilchens mit Geschwindigkeit 1 in der Ebene. Das Punktteilchen bewegt sich geradlinig. Wenn es auf eine der drei Kreisscheiben $B_1, B_2, B_3 \subseteq \mathbb{R}^2$ vom Radius 1 trifft, die auf den Ecken eines gleichseitigen Dreiecks der Kantenlänge $d > 2$ liegen, wird es nach dem Gesetz "Ausfallswinkel = - Einfallswinkel" reflektiert. Der Phasenraum P des Teilchens ist damit von der Form

$$P := M \times S^1 \quad \text{mit} \quad M := \mathbb{R}^2 \setminus (B_1 \cup B_2 \cup B_3).$$



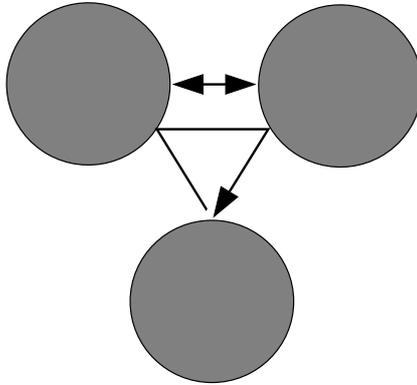
Der Winkel $\varphi \in S^1$ parametrisiert die Geschwindigkeitsrichtung des Teilchens gegen eine feste Vorzugsrichtung.

Wir bezeichnen mit $\Phi_t : P \rightarrow P$, $t \in \mathbb{R}$ die Lösung der Bewegungsgleichung für die Zeit t . Ist Ort und Richtung des Teilchens also zum Zeitpunkt 0 durch $x_0 := (q_0, \varphi_0) \in P$ gegeben, so befindet sich das Teilchen zum Zeitpunkt t bei

$$\Phi_t(x_0) = (q(t, x_0), \varphi(t, x_0)) \in P.$$

Typischerweise wird das Teilchen nach wenigen Stößen das Wechselwirkungsgebiet verlassen und geradlinig nach unendlich laufen. Entsprechendes gilt für negative Zeiten.

Andererseits gibt es offensichtlich Bahnen, die immer im Endlichen bleiben, beispielsweise die angedeuteten periodischen Bahnen:



Verlässt das Teilchen erst einmal die Kreisscheibe vom Radius R , z. B. $R := 2d$, so kann es in Zukunft nicht mehr gestreut werden.

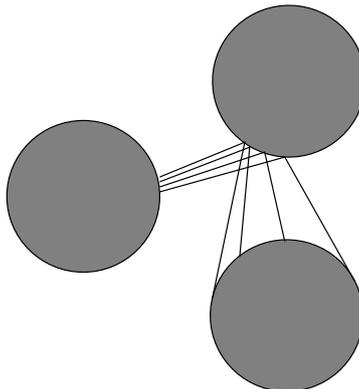
Frage: Was ist die Struktur der Menge

$$\Lambda := \{x_0 \in P \mid \forall t \in \mathbb{R} \quad |q(t, x_0)| < R\}$$

der gebundenen Bahnen?

Das physikalische Interesse an dieser Frage wird dadurch verstärkt, dass auch wichtige qualitative Fragen über Streubahnen nur durch Analyse von Λ beantwortet werden können.

Als entscheidend für das Verständnis von Λ stellt sich nun folgende Bemerkung heraus: Alle Bahnen in Λ sind instabil (hyperbolisch), benachbarte Bahnen laufen typischerweise exponentiell in der Zeit auseinander:



Da jede Bahn in Λ immer wieder mit den Kreisscheiben kollidiert, die Bewegung zwischen den Kollisionen aber einfach ist, lohnt es sich, nicht Φ_t zu untersuchen, sondern die diskrete Abbildung, die die Daten aufeinander folgender Kollisionen aufeinander abbildet. Diese Daten lassen sich durch zwei Winkel

(für jede Kreisscheibe) parametrisieren. Aus Symmetriegründen brauchen wir nur die Kreisscheibe B_1 zu betrachten.

Wir bezeichnen die Bogenlänge (gleich dem Winkel, da Radius 1) des Auftreffortes q , gesehen vom Mittelpunkt von B_1 , mit l und den Sinus des Winkel der Auftreffrichtung, relativ zur Normalenrichtung bei q mit u .

Es gilt also $(l, u) \in Q := \{(l, u) \in [-\pi, \pi] \times [-1, 1]\}$.

Wie sieht die Teilmenge $W_{3,1} \subseteq Q$ der Punkte in Q aus, die zuletzt an B_3 gestreut wurden? Ist der Abstand d zwischen den Streuscheiben groß, so gilt für

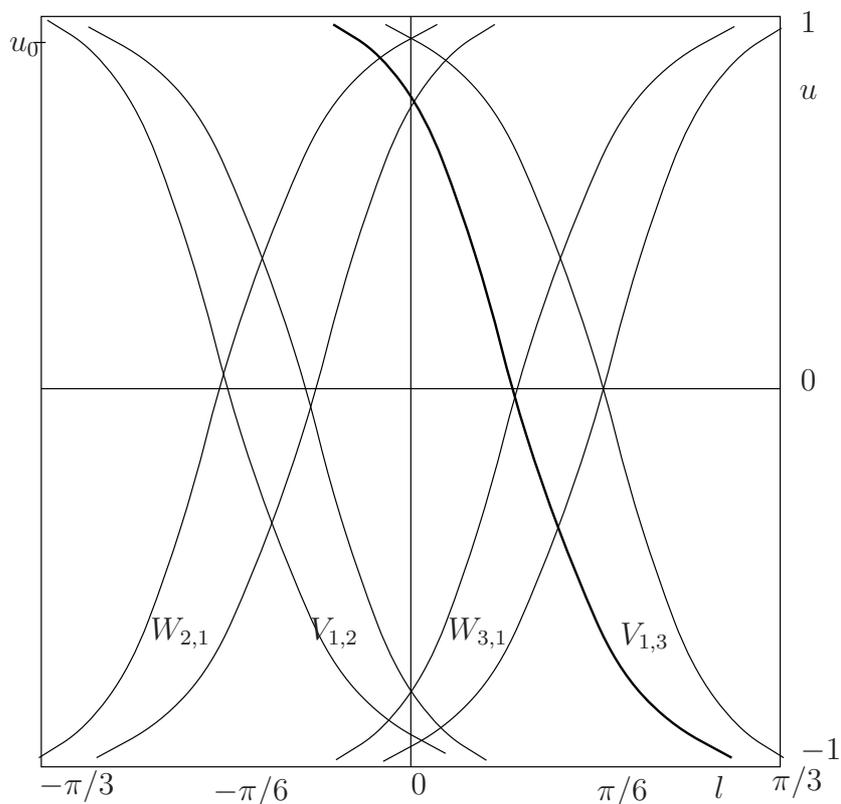


Abbildung 12.1: Poincaréschnitt für die 1. Scheibe

$(l, u) \in W_{3,1}$ näherungsweise $l - \arcsin(u) \approx \frac{\pi}{6}$. Entsprechend gilt für die von B_2 kommende Teilmenge $W_{2,1}$ näherungsweise $l - \arcsin(u) \approx -\frac{\pi}{6}$, siehe Abb. 12.1.

Andererseits gilt wegen des Reflexionsgesetzes "Ausfallswinkel = - Einfallswinkel" für die Mengen $V_{1,2}$ bzw. $V_{1,3}$ der in Richtung B_2 bzw. B_3 gestreuten Punkte aus Q : $l + \arcsin(u) \approx -\frac{\pi}{6}$ bzw. $l + \arcsin(u) \approx \frac{\pi}{6}$.

Die Bahnen, die von B_3 kommend an B_1 in Richtung B_2 gestreut werden, befinden sich folglich in der Menge $W_{3,1} \cap V_{1,2}$ etc. Diese vier Mengen haben

näherungsweise die Form von Rauten.

Wir können diese Konstruktion iterieren, indem wir auch die Kreisscheibe der vorletzten Streuung und der übernächsten Streuung betrachten. Es gibt dann insgesamt $2^4 = 16$ Kombinationen und die entstehenden Schnittmengen sehen ungefähr wie in Abb. 12.2 aus.

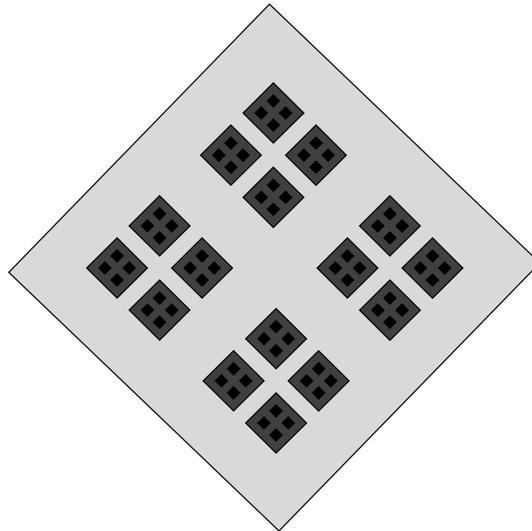


Abbildung 12.2: Iterierte Poincaréabbildung

Der Schnitt Λ_Q von Λ mit der Menge $\{(q, \varphi) \in P \mid \vec{q} \in \partial \overline{B_1}\}$ der Kollisionpunkte mit der ersten Scheibe besitzt die Form einer Cantormenge, ist also eine kompakte nicht leere Menge, die total unzusammenhängend ist (d. h. das Innere von Λ_Q ist leer) und bei der jeder Punkt ein Häufungspunkt ist.

Solche Mengen sind homöomorph zu der im letzten Abschnitt betrachteten $1/3$ -Menge von Cantor.

Andererseits ist Λ_Q homöomorph zu dem Konfigurationsraum $\Omega = E^{\mathbb{Z}}$ einer Spinkette, und wir können den Homöomorphismus auch einfach angeben. Ein Punkt aus Λ_Q entspricht einem Schnittpunkt einer gebundenen Bahn mit Q . Einen solchen Punkt können wir nun eindeutig durch die zweifach unendliche Folge von Elementen $(i_k)_{k \in \mathbb{Z}}$ der Menge $\{1, 2, 3\}$ charakterisieren, indem wir angeben, in welcher Reihenfolge die Kreisscheiben besucht werden. Nach Voraussetzung ist $i_0 = 1$. Es kann keine direkt aufeinanderfolgenden Kollisionen mit der gleichen Kreisscheibe geben, $i_k \neq i_{k+1}$ ($k \in \mathbb{Z}$).

Daher können wir auch eine einfachere Kodierung der Orbits vornehmen, indem wir einen Orbit durch ein Element $\omega \in E^{\mathbb{Z}}$ charakterisieren. ω_k sei dabei $= +1$, wenn die $(k+1)$ -te besuchte Kreisscheibe die der k -ten Kreisscheibe im

Gegenuhrzeigersinn benachbarte ist, sonst = -1.

Im Sinne der Statistischen Mechanik entspricht damit jeder Punkt aus Λ_Q eindeutig einer Konfiguration der Spinkette und es lässt sich zeigen, dass die so definierte Abbildung $\Lambda_Q \rightarrow \Omega$ umkehrbar stetig ist.

Jeder Funktion auf Λ_Q entspricht damit eine Funktion auf Ω , z. B. können wir die Länge des Bahnstücks zwischen Λ_Q und der nächsten Kollision betrachten. Wir erhalten damit relativ leicht statistische Aussagen über die Verteilungen dieser Längen. Das betrachtete Problem enthält den Abstand d der Kreisscheiben als Parameter. Wir können uns fragen, ob Erwartungswerte von Größen wie z. B. der Länge analytisch von d abhängen oder nicht. Zur Beantwortung dieser Fragen können wir die Methoden der Statistischen Mechanik benutzen ²⁹.

13 Numerik

13.1 Monte–Carlo–Simulation von Markovketten	159
13.2 Der Metropolis–Algorithmus	161
13.3 Nicht lokale Methoden	164

Zwar lassen sich mit numerischen Mitteln in den meisten Fällen keine mathematischen Aussagen ableiten. Trotzdem hat die Numerik in der Mathematik, und auch speziell in der mathematischen Statistischen Mechanik, ihren Stellenwert. Sie dient hier hauptsächlich dazu, Hypothesen zu formulieren bzw. empirisch zu testen. Wer schon einmal über einige Wochen vergeblich versucht hat, eine falsche Vermutung zu beweisen, ist sich über den Wert empirischer Kenntnis in der Mathematik im Klaren. Natürlich besteht die Hauptarbeit weiterhin in dem Beweis aufgestellter Hypothesen.

Betrachten wir zunächst Spinsysteme, so ist eine Hauptfrage die nach der Temperaturabhängigkeit von observablen Größen. Diese sind für endliche Spinsysteme durch endliche Summen gegeben:

$$\langle O \rangle (\beta) = \frac{\sum_{\sigma \in E^N} O(\sigma) \cdot e^{-\beta H_N(\sigma)}}{\sum_{\sigma \in E^N} e^{-\beta H_N(\sigma)}}.$$

Es liegt daher zunächst nahe, diese endlichen Summen durch einen Computer errechnen zu lassen. Dies stellt sich aber als nicht sehr sinnvoll heraus, denn die

²⁹Siehe z. B. für Beweise und weitere Referenzen Kapitel 3 von A. Knauf, Ya. Sinai: Classical Nonintegrability, Quantum Chaos. DMV–Seminar Band 27. Basel: Birkhäuser 1997

Zahl der Konfigurationen ist 2^N . Betrachten wir beispielsweise das zweidimensionale Isingmodell, so ist für 10×10 Spins $2^N = 2^{100} \approx 10^{30}$ und damit viel zu groß für bestehende wie zukünftige Rechner.

Andererseits sind wir mit Kantenlänge 10 doch noch recht weit vom thermodynamischen Limes $N \rightarrow \infty$ entfernt in dem Sinn, dass wir z. B. den Phasenübergang nur schlecht sehen.

Obwohl die explizite Berechnung von Erwartungswerten im Allgemeinen nicht möglich ist, gibt es recht effektive Methoden zu ihrer näherungsweisen Berechnung.

Der Schlüssel zu dieser Tatsache liegt in der Beobachtung, dass für gegebene Temperatur der Hauptbeitrag zur Zustandssumme von Konfigurationen herrührt, deren Energie nahe beim Energieerwartungswert liegt. Mit anderen Worten, die Observable "Energie" besitzt eine geringe (relative) Streuung. Andererseits sind in der Zustandssumme die meisten Summanden Boltzmannfaktoren zu vom Mittelwert stark abweichenden Energien.

Sie liefern einen kleinen Beitrag, entweder weil ihre Anzahl für zu kleine Energien klein ist oder weil ihre Boltzmannfaktoren für zu große Energien zu klein sind. Ihre Berechnung verschwendet damit nur Rechenzeit.

Stattdessen verschafft man sich eine repräsentative Stichprobe von Konfigurationen und berechnet für diese Erwartungswerte von Observablen.

13.1 Monte–Carlo–Simulation von Markovketten

Der typische Ausgangspunkt bei der numerischen Simulation von Spinsystemen ist ein Konfigurationsraum von der Form $\mathcal{S} := E^\Lambda$ für eine endliche Teilmenge $\Lambda \subseteq \mathbb{Z}^d$, und eine Energiefunktion $H : \mathcal{S} \rightarrow \mathbb{R}$. Diese kann, muss aber nicht Randbedingungen enthalten. Jedenfalls definiert sie für inverse Temperatur $\beta > 0$ das Gibbsmaß, d.h. den Wahrscheinlichkeitsvektor $p \in \mathbb{R}^{\mathcal{S}}$ mit den Komponenten $p_\omega = \frac{e^{-\beta H(\omega)}}{Z(\beta)}$.

- Gesucht wird nun zunächst eine irreduzible stochastische Matrix $P = (p_{\omega, \omega'})_{\omega, \omega' \in \mathcal{S}}$ mit Eigenvektor p (siehe Anhang E). Solche Matrizen gibt es viele, und wir werden sehen, welche praktischen Kriterien man zusätzlich an sie anlegt.
- Die Monte–Carlo–Simulation beginnt mit der Wahl von $\omega_0 \in \mathcal{S}$. Diese Konfiguration kann – mit Hilfe sog. Pseudozufallszahlen – zufällig gewählt werden. Manchmal benutzt man aber auch eine Grundzustandskonfiguration der Energiefunktion H , etc.
- Für eine vorgegebene Zahl T von Schritten wird entsprechend den Wahrscheinlichkeiten $p_{\omega_{t-1}, \omega}$, $\omega \in \mathcal{S}$ für $t = 1, \dots, T - 1$ die Konfiguration

$\omega_t \in \Omega$ gewählt.

Es stellen sich hier folgende Fragen:

1. Inwieweit ist das Ensemble $(\omega_0, \dots, \omega_{T-1})$ von Konfigurationen eine repräsentative Stichprobe?
2. Warum wählt man nicht einfach entsprechend den Gibbswahrscheinlichkeiten $p_\omega = \frac{e^{-\beta H(\omega)}}{Z(\beta)}$ zufällig die Konfigurationen ω ?

Die Antwort auf Frage 2. ist einfach: Während sich der Zählerausdruck in p_ω , d.h. der Boltzmannfaktor $e^{-\beta H(\omega)}$, im Allgemeinen leicht berechnen lässt, ist dies für die Zustandssumme $Z(\beta) = \sum_{\omega' \in \Omega} e^{-\beta H(\omega')}$ im Nenner wegen der übergroßen Zahl von Summanden nicht der Fall.

Eine allgemeine Antwort auf Frage 1. kann man nur für den Limes $T \rightarrow \infty$ einer großen Stichprobe erwarten:

13.1 Satz Für eine irreduzible Markovkette (p, P) konvergiert das so genannte empirische Maß

$$\mu_\omega^{(T)} := \frac{1}{T} \sum_{t=0}^{T-1} \delta_{\omega_t}$$

auf \mathcal{S} für \mathbb{P} -fast alle $\omega = (\omega_0, \dots, \omega_{T-1}, \dots) \in \Omega = S^{\mathbb{N}_0}$ gegen p . $\lim_{T \rightarrow \infty} \mu_\omega^{(T)} = p$ für \mathbb{P} -fast alle $\omega \in \Omega$.

Bew.: Gemäß Satz E.8 aus Anhang E ist die Shiftabbildung

$$\sigma : \Omega \rightarrow \Omega, \quad \sigma(\omega)_t = \omega_{t+1} \quad \text{auf } \Omega$$

ergodisch bezüglich des Wahrscheinlichkeitsmaßes \mathbb{P} . Nach dem Ergodensatz von Birkhoff existiert daher das Zeitmittel von L^1 -Funktionen $f : \Omega \rightarrow \mathbb{R}$

$$\bar{f}(\omega) := \lim_{T \rightarrow \infty} \frac{1}{T} \sum_{t=0}^{T-1} f(\sigma^t(\omega))$$

für \mathbb{P} -fast alle $\omega \in \Omega$ und ist gleich $\mathbb{E}(f)$. Insbesondere gilt dies für die Funktionen f_i ($i \in \mathcal{S}$)

$$f_i(\omega) = \begin{cases} 1 & , \quad \Omega_0 = i \\ 0 & , \quad \text{sonst,} \end{cases}$$

und $\mathbb{E}(f_i) = \mathbb{P}(X_0 = i) = p_i$.

Andererseits ist

$$\mu_\omega^{(T)}(i) = \frac{1}{T} \sum_{t=0}^{T-1} \delta_{\omega_t}(i) = \frac{1}{T} \sum_{t=0}^{T-1} f_i(\sigma^t(\omega)),$$

woraus die Behauptung folgt. \square

Dieser Satz sagt uns, dass wir bei Anwendung der Monte–Carlo–Simulation gute Chancen haben, das Gibbsmaß gut anzunähern, wenn der Raum S der Konfigurationen nicht zu groß ist, insbesondere wenn $|S| = N \ll T$. Dies ist jedoch in der Praxis gerade nicht der Fall, denn für Spinsysteme ist $|S| = |E^\Lambda| = 2^{|\Lambda|}$. Allerdings sind wir oft daran interessiert, Erwartungswerte von makroskopischen Observablen (wie Energiedichte, mittlere Magnetisierung etc.) zu gewinnen, die selbst schon Mittelwerte über Translationen im Λ umfassenden Gitter \mathbb{Z}^d darstellen. Diese besitzen daher geringere Varianz und sind entsprechend unempfindlicher gegen numerische Schwankungen.

Natürlich ist der obige Konvergenzsatz kein Freibrief für die unkontrollierte Verwendung numerischer Methoden. Insbesondere ist zu achten auf

- die Verwendung eines guten Generators von Pseudozufallszahlen (siehe z.B. MADRAS [Ma], Kapitel 2).
- die Verwendung einer stochastischen Matrix P , die eine schnelle Konvergenz gegen den Wahrscheinlichkeitsvektor p garantiert.

Der zweiten Problematik wenden wir uns im folgenden Abschnitt zu.

13.2 Der Metropolis–Algorithmus

Wir haben im Anhang E bemerkt, dass jede symmetrische stochastische Matrix $Q \in \mathcal{M}(N, \mathbb{R})$ den Wahrscheinlichkeitsvektor $(1/N, \dots, 1/N) \in \mathbb{R}^N$ als Perron–Frobenius–Eigenvektor hat. Im Metropolis–Algorithmus wird nun eine solche irreduzible Matrix $Q = (q_{i,j})_{i,j \in S}$ modifiziert, sodass sie stattdessen den Wahrscheinlichkeitsvektor p als Perron–Frobenius–Eigenvektor besitzt. Die modifizierte Matrix $P = (p_{i,j})_{i,j \in S}$ hat die Einträge

$$p_{i,j} = \begin{cases} q_{i,j} F(p_j/p_i) & , \quad j \neq i \\ 1 - \sum_{k \in S \setminus \{i\}} q_{i,k} F(p_k/p_i) & , \quad j = i. \end{cases} \quad (13.1)$$

mit $F(x) := \min(x, 1)$.

Man überprüft, dass $p_{i,j} \geq 0$ und $\sum_{j \in S} p_{i,j} = 1$ gilt, also auch P eine stochastische Matrix ist. Wie Q ist sie irreduzibel, und außerdem gilt $p_i p_{i,j} = p_j p_{j,i}$, denn für $j \neq i$ ist $p_i p_{i,j} = q_{i,j} \min(p_i, p_j)$ in i und j symmetrisch. Damit ist p Perron–Frobenius Eigenvektor von P .

Der Vorteil dieser Definition liegt darin, dass die Komponenten des Wahrscheinlichkeitsvektors nur in Form des Quotienten p_j/p_i vorkommen, sodass sich die unbekannte Zustandssumme $Z(\beta)$ herauskürzt:

$$p_j/p_i = \exp(\beta(H(i) - H(j))). \quad (13.2)$$

Kurz gesagt sorgt die Matrix Q für die Irreduzibilität von P , während der Faktor $F(x)$, angewandt auf $x = p_j/p_i$, garantiert, dass p Perron–Frobenius–Eigenvektor ist. Man kann $F(x) \in [0, 1]$ als die Wahrscheinlichkeit interpretieren, dass der Vorschlag des Übergangs vom i -ten zum j -ten Zustand akzeptiert wird; ansonsten wird der Zustand nicht verändert. Die Matrix Q heißt daher *proposal matrix*. Bei der obigen Wahl von F wird also der Vorschlag des Übergangs zu einem energieärmeren Zustand gemäß (13.2) immer akzeptiert.

13.2 Beispiel (Glauber–Dynamik für das Isingmodell) Für $\Lambda \in \mathcal{S}(d)$ ist $S := E^\Lambda$ der Konfigurationsraum. Wir setzen für den Gitterpunkt $l \in \Lambda$ die proposal matrix $Q^{(l)}$ auf \mathbb{R}^S wie folgt an:

$$Q_{\sigma, \sigma'}^{(l)} := \begin{cases} 1 & , \quad \sigma'_l = -\sigma_l, \quad \sigma'_m = \sigma_m \quad (m \in \Lambda \setminus \{l\}) \\ 0 & , \quad \text{sonst.} \end{cases}$$

Es wird also mit Wahrscheinlichkeit 1 genau der Spin an Gitterpunkt l invertiert. Damit ist für die Energiefunktion

$$H_\Lambda : S \rightarrow \mathbb{R} \quad , \quad H_\Lambda(\sigma) = \frac{1}{2} \sum_{\substack{n, l \in \Lambda \\ \|k-l\|=1}} \sigma_k \sigma_l - h \sum_{k \in \Lambda} \sigma_k$$

die Wahrscheinlichkeit

$$F(p_{\sigma'}/p_\sigma) = \min \left(1, \exp \left(-2\sigma_l \left(\sum_{k \in \Lambda: \|k-l\|=1} \sigma_k + h \right) \right) \right).$$

Da die Matrix $Q^{(l)}$ symmetrisch ist, ist die Matrix $P^{(l)}$ mit Einträgen $p_{\sigma, \sigma'}^{(l)} = q_{\sigma, \sigma'}^{(l)}$, $F(p_{\sigma'}/p_\sigma)$ reversibel. Allerdings ist sie (für $|\Lambda| > 1$) nicht irreduzibel, denn es wird ja höchstens der Spin bei $l \in \Lambda$ invertiert. Daher werden alle Spins in Λ abgearbeitet. Dies kann entweder in einer vorgegebenen Reihenfolge geschehen, d.h. für eine Nummerierung $\{l_i\}$ der Gitterpunkte unter Verwendung der stochastischen Matrix

$$P := P^{(l_1)} P^{(l_2)} \dots P^{(l_{|\Lambda|})}. \quad (13.3)$$

Oder der Gitterpunkt wird auf Λ gleich verteilt ausgewürfelt, was der stochastischen Matrix

$$P := \frac{1}{|\Lambda|} \sum_{l \in \Lambda} P^{(l)} \quad (13.4)$$

entspricht.

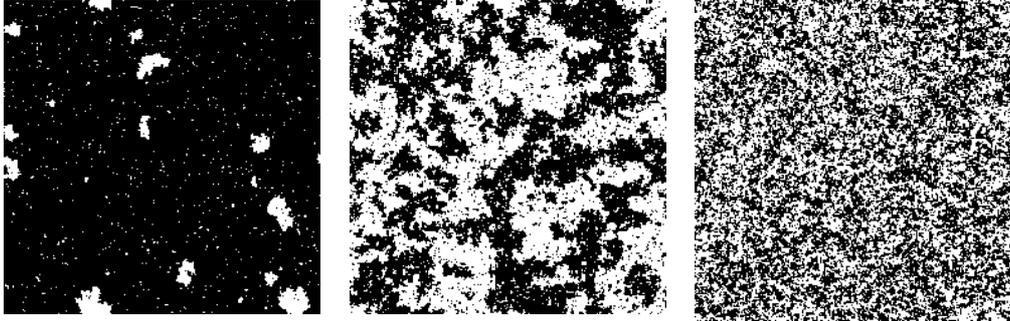


Abbildung 13.1: Zweidimensionales Isingmodell mit 250×250 Spins und periodischen Randbedingungen (Kritische Temperatur T_{cr} ; Schwarz: Spin = 1, Weiß: Spin = -1). Links: $\frac{3}{4} T_{\text{cr}}$, Mitte: T_{cr} , Rechts: $\frac{3}{2} T_{\text{cr}}$

Allerdings ist in obigem Beispiel die stochastische Matrix P im Allgemeinen nicht irreduzibel. Das liegt daran, dass jeder Spin-Flip akzeptiert wird, wenn er die Energie nicht ändert.

Daher benutzt man statt (13.1) oft die Funktion

$$F(x) := \frac{x}{1+x} \quad (x \in [0, \infty]). \quad (13.5)$$

Diese besitzt wie $F(x) = \min(1, x)$ die Eigenschaften $0 \leq F(x) \leq 1$ und die für die Reversibilität der Matrix P wichtige Bedingung $F(1/x) = F(x)/x$. Andererseits sind für $x \in (0, \infty)$ sowohl die Akzeptanzwahrscheinlichkeit $F(x) > 0$ als auch $1 - F(x) > 0$.

13.3 Beispiel Wärmebad-Dynamik für das Isingmodell

Mit den Bezeichnungen des letzten Beispiels ist für die Wahl (13.5)

$$\begin{aligned} F(p'_\sigma/p_\sigma) &= \frac{p'_\sigma}{p_\sigma + p_{\sigma'}} \\ &= \frac{\exp\left(-\beta\sigma_l \left(\sum_{\|k-l\|=1} \sigma_k + h\right)\right)}{\exp\left(\beta\sigma_l \left(\sum_{\|k-l\|=1} \sigma_k + h\right)\right) + \exp\left(-\beta\sigma_l \left(\sum_{\|k-l\|=1} \sigma_k + h\right)\right)}. \end{aligned}$$

Die Akzeptanzwahrscheinlichkeit ist also gleich dem Gibbsmaß des l -ten Spins bei inverser Temperatur β , im Feld $\sum_{\substack{k \in \Lambda \\ \|k-l\|=1}} \sigma_k + h$ der fixierten Nachbarspins σ_k , vermehrt um h .

Sowohl die stochastische Matrix (13.3) des sequentiellen Verfahrens als auch (13.4) ist für das Wärmebadverfahren irreduzibel, denn jeder Spin σ_l , $l \in \Lambda$ wird mit positiver Wahrscheinlichkeit invertiert oder auch nicht.

13.3 Nicht lokale Methoden

Die zuletzt vorgestellten Monte–Carlo–Verfahren (Glauber– und Wärmebadynamik) basieren auf der Modifikation je eines Spins. Daher funktionieren sie gut, solange im Gitter \mathbb{Z}^d weit voneinander entfernte Spins wenig voneinander abhängen, also die trunkierten Korrelationsfunktionen $\langle s_k s_l \rangle - \langle s_k \rangle \langle s_l \rangle$ für große $\|k - l\|$ betragsmäßig klein sind.

Dies ist dann der Fall, wenn das asymptotische Gibbsmaß eindeutig ist.

Ausgerechnet für den interessanten Fall der Phasenkoexistenz dagegen wird ein solches lokales Verfahren nur langsam konvergieren, denn es treten langreichweitige Korrelationen auf (*critical slowing down*).³⁰

Beispielsweise besitzt für das ferromagnetische Isingmodell in $\Lambda \subseteq \mathbb{Z}^d$, $d \geq 2$ für inverse Temperaturen $\beta < \beta_{\text{cr}}$ die Verteilung der mittleren Magnetisierung zwei ausgeprägte Maxima, und der Übergang zwischen diesen Werten der spontanen Magnetisierung dauert bei Verwendung lokaler Methoden sehr lange. Dies ist nicht nur nachteilig, denn auch die natürliche Dynamik ist lokal, und bei lokalen Verfahren werden so genannte *metastabile Zustände* sichtbar, die streng genommen keine Phasen sind, aber trotzdem Langzeitstabilität besitzen, siehe Abb. 13.2, im Vergleich mit Abb. 13.1.

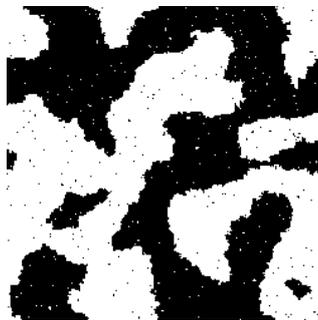


Abbildung 13.2: Metastabiler Zustand bei der Simulation des zweidimensionalen Isingmodells mit periodischen Randbedingungen bei Temperatur $\frac{2}{3} T_{\text{cr}}$

So besitzt das ferromagnetische Isingmodell auf \mathbb{Z}^d für äußeres Magnetfeld $h < 0$ nur eine Phase (negative Magnetisierung) aber für $\beta < \beta_{\text{cr}}$ und betragsmäßig kleine h tritt ein metastabiler Zustand positiver Magnetisierung auf.

Tatsächlich existieren alternative, nicht lokale Monte–Carlo–Methoden, bei denen das Phänomen des *critical slowing down* kaum auftritt. Diese sind aber

³⁰Dieses Phänomen wird im Übersichtsartikel [So] von SOKAL über Monte–Carlo–Methoden diskutiert.

noch in dem Sinn lokal, dass die zum Auffrischen eines Spinwertes notwendige Rechenzeit nahezu unabhängig von der Größe $|\Lambda|$ des simulierten Gebietes ist.

Eine solche Methode ist der von SWENDSEN und WANG in [SwWa] vorgestellte Algorithmus. Er erlaubt die Simulation von Pottsmodellen auf beliebigen Graphen.

Es sei (V, E) ein Graph mit Knoten aus der endlichen Knotenmenge V und Kanten $\{v, w\} \in E$ zwischen Knoten $v \neq w \in V$.

13.4 Definition *Das (ferromagnetische) Pottsmodell mit s -Spins auf (V, E) besitzt Konfigurationsraum $\Omega_P := \{1, \dots, s\}^V$ und Energiefunktion*

$$H : \Omega_P \rightarrow \mathbb{R} \quad , \quad \sigma \mapsto - \sum_{\{v,w\} \in E} (\delta_{\sigma_v, \sigma_w} - 1).$$

Der Fall von $s = 2$ Spinwerten entspricht (nach einer affinen Transformation von H) dem ferromagnetischen Isingmodell auf (V, E) .

Üblicherweise werden endliche $V \subseteq \mathbb{Z}^d$ mit Kantenmenge $E := \{\{v, w\} \subseteq V \mid \|v - w\| = 1\}$ betrachtet.

Für inverse Temperatur $\beta \geq 0$ induziert H auf Ω_P das Gibbsmaß \mathbb{P}_P mit

$$\mathbb{P}_P(\sigma) = Z_P^{-1} \prod_{\{v,w\} \in E} (q + p\delta_{\sigma_v, \sigma_w}) \quad (\sigma \in \Omega_P).$$

Dabei ist $q := e^{-\beta}$, $p := 1 - q \in [0, 1]$ (und wie üblich ist die Zustandssumme Z_P so gewählt, dass \mathbb{P}_P ein Wahrscheinlichkeitsmaß ist).

Entsprechend einer auf Fortuin und Kasteleyn zurückgehenden Idee wird nun auf $\Omega_{FK} := \Omega_P \times \Omega_{RC}$ mit $\Omega_{RC} := 2^E$ das Maß \mathbb{P}_{FK} mit

$$\mathbb{P}_{FK}(\sigma, \Lambda) := Z_P^{-1} p^{|\Lambda|} q^{|E-\Lambda|} \prod_{\{v,w\} \in \Lambda} \delta_{\sigma_v, \sigma_w} \quad (\sigma \in \Omega_P, \Lambda \subseteq E)$$

betrachtet.

Die Teilmenge $\Lambda \subseteq E$ von Kanten induziert auf der Knotenmenge V die Äquivalenzrelation bei der v genau dann zu w äquivalent ist, wenn ein Kantenzug in Λ existiert, der bei v beginnt und bei w endet. Damit wird V in die Äquivalenzklassen v_i , $i \in I(\Lambda)$ zerlegt:

$$V = \bigcup_{i \in I(\Lambda)} V_i \tag{13.6}$$

und $\mathbb{P}_{FK}(\sigma, \Lambda)$ ist genau dann positiv, wenn in den Zusammenhangskomponenten v_i die Spinwerte einander gleich sind.

Andererseits induziert $\sigma \in \Omega_P$ die Kantenmenge

$$E(\sigma) := \{\{v, w\} \in E \mid \sigma_v = \sigma_w\}.$$

13.5 Satz 1. \mathbb{P}_{FK} ist ein Wahrscheinlichkeitsmaß mit dem Gibbsmaß \mathbb{P}_P des Pottsmodells als Ω_P -Marginal, d.h.

$$\sum_{\Lambda \in \Omega_{RC}} \mathbb{P}_{FK}(\sigma, \Lambda) = \mathbb{P}_P(\sigma) \quad (\sigma \in \Omega_P).$$

2. Das Ω_{RC} -Marginal \mathbb{P}_{RC} von \mathbb{P}_{FK} ist gegeben durch

$$\mathbb{P}_{RC}(\Lambda) = Z_P^{-1} p^{|\Lambda|} q^{|E-\Lambda|} s^{I(\Lambda)} \quad (\Lambda \subseteq E).$$

3. Die bedingten Wahrscheinlichkeiten sind gegeben durch

$$\mathbb{P}_{FK}(\sigma \mid \Lambda) = \begin{cases} s^{-|I(\Lambda)|} & , \quad \Lambda \subseteq E(\sigma) \\ 0 & , \quad \text{sonst} \end{cases} \quad (\sigma \in \Omega_P, \Lambda \subseteq E)$$

und

$$\mathbb{P}_{FK}(\Lambda \mid \sigma) = \begin{cases} p^{|\Lambda|} q^{|E(\sigma)-\Lambda|} & , \quad \Lambda \subseteq E(\sigma) \\ 0 & , \quad \text{sonst} \end{cases} \quad (\sigma \in \Omega_P, \Lambda \subseteq E).$$

13.6 Bemerkung *RC* steht für *random cluster*. Dieses Modell der Statistischen Mechanik (siehe GRIMMETT [Gri2]) ist eine Verallgemeinerung des Spezialfalls $s = 1$, der sog. *Kanten-Perkolation* auf (V, E) . Bei Letzterer werden unabhängig gleichverteilt mit Wahrscheinlichkeit p Kanten aus E ausgewählt, und man interessiert sich für die Struktur der Zusammenhangskomponenten. Der für $s > 1$ hinzukommende Gewichtungsfaktor $s^{|I(\Lambda)|}$ begünstigt eine große Zahl von Zusammenhangskomponenten (siehe GRIMMETT [Gri1]).

Bew.: Aus der Definition von \mathbb{P}_{FK} schließen wir

$$\mathbb{P}_{FK}(\sigma, \Lambda) = \begin{cases} Z_P^{-1} p^{|\Lambda|} q^{|E-\Lambda|} & , \quad \Lambda \subseteq E(\sigma) \\ 0 & , \quad \text{sonst.} \end{cases} \quad (13.7)$$

1. Daraus ergibt sich

$$\begin{aligned} \sum_{\Lambda \in \Omega_{RC}} \mathbb{P}_{FK}(\sigma, \Lambda) &= Z_P^{-1} \sum_{\Lambda \subseteq E(\sigma)} p^{|\Lambda|} q^{|E-\Lambda|} \\ &= Z_P^{-1} q^{|E-E(\sigma)|} \sum_{\Lambda \subseteq E(\sigma)} p^{|\Lambda|} q^{|E(\sigma)-\Lambda|} \\ &= Z_P^{-1} q^{|E-E(\sigma)|}. \end{aligned} \quad (13.8)$$

Dies ist aber gleich $\mathbb{P}_p(\sigma)$, denn

$$\prod_{\{v,w\} \in E} (q + p \delta_{\sigma_v, \sigma_w}) = \prod_{e \in E(\sigma)} (q + p) \prod_{e \in E - E(\sigma)} q.$$

Da \mathbb{P}_p ein Wahrscheinlichkeitsmaß ist, folgt dies auch für \mathbb{P}_{FK} .

2. Solange $E(\sigma) \supseteq \Lambda$ gilt, erhalten wir für $\mathbb{P}_{FK}(\sigma, \Lambda)$ in (13.7) den σ -unabhängigen Ausdruck $Z_p^{-1} p^{|\Lambda|} q^{|E-\Lambda|}$. Die Bedingung ist genau für die auf den Zusammenhangskomponenten V_i in (13.6) konstanten σ erfüllt. Deren Anzahl ist $s^{|\Lambda|}$.
3. $\mathbb{P}_{FK}(\sigma \mid \Lambda) = \mathbb{P}_{FK}(\sigma, \Lambda) / \mathbb{P}_{RC}(\Lambda)$. Daraus ergibt sich mit (13.7) und (13.6) die Formel. Analog ergibt sich $\mathbb{P}_{FK}(\Lambda \mid \sigma) = \mathbb{P}_{FK}(\sigma, \Lambda) / \mathbb{P}_{FK}(\sigma)$ aus (13.7) und (13.8). \square

Die Formeln für die bedingten Wahrscheinlichkeiten legen die Verwendung der folgenden Markovkette zur Approximation von \mathbb{P}_{FK} nahe:

- Bei gegebener Konfiguration $\Lambda \subseteq E$ von Kanten wird unabhängig für jede Zusammenhangskomponente V_i mit Wahrscheinlichkeit $1/s$ ein auf V_i konstanter Spinwert gewählt.
- Für diese Spinkonfiguration $\sigma \in \Omega_P$ wird $\Lambda' \subseteq E$ gewählt, wobei $e = \{v, w\} \in E$ mit Wahrscheinlichkeit q Element von Λ' ist, falls $\sigma_v = \sigma_w$, und sonst $e \notin \Lambda'$.

13.7 Korollar Für $\beta > 0$ ist die Markovkette irreduzibel-aperiodisch auf $\tilde{\Omega} := \{(\sigma, \Lambda) \in \Omega_{FK} \mid \Lambda \subseteq E(\sigma)\}$.

Bew.: Von allen $\Lambda \subseteq E$ ausgehend können wir mit positiver Wahrscheinlichkeit $s^{-|\Lambda|}$ die konstante Spinkonfiguration $\sigma_v \equiv 1$ erreichen, von dieser ausgehend $\Lambda' = \emptyset$.

In einem zweiten Doppelschritt können wir, ausgehend von $(1, \emptyset) \in \tilde{\Omega}$, jedes Element von $\tilde{\Omega}$ erreichen. \square

Da jeweils ganze Zusammenhangskomponenten V_i einen neuen Spinwert zugewiesen bekommen, konvergiert diese Markovkette auch für inverse Temperaturen $\beta > \beta_{cr}$ schnell.

In [ES] wurde von EDWARDS und SOKAL gezeigt, wie die obige Methode (Einführung des vergrößerten Konfigurationsraumes Ω_{FK} , und Definition einer Markovkette auf diesem) auf nahezu beliebige Modelle verallgemeinert werden kann. Allerdings ist i. Allg. kein dem Swendsen–Wang–Algorithmus vergleichbarer Effizienzgewinn zu erwarten.

Es gibt verschiedene Wege, statistisch-mechanische Systeme numerisch zu behandeln.

Ein solcher Weg läuft unter dem Stichwort "*Molekulardynamik*". Betrachten wir z. B. das System von n harten Kugeln in einem Behälter, ein einfaches Modell eines Gases.

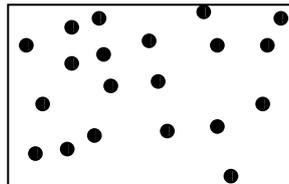


Abbildung 13.3: Kugelförmige Gasatome in einem Container

Statt die kanonische Zustandssumme, die in diesem Fall ein Integral ist, direkt zu berechnen, kann man auch die Bewegungsgleichungen der Kugeln numerisch integrieren. Statt (Phasen-) Raummitteln von Observablen werden dann Zeitmittel berechnet.

Natürlich bleibt hier die Gesamtenergie entlang einer Bahn konstant. Wenn wir die Ergodizität des betrachteten Systems voraussetzen, also annehmen, dass eine typische Trajektorie die Energieschale dicht umspinnt, sollte das Zeitmittel über eine lange Trajektorie nahe dem Raummittel über die Energieschale sein.

Tatsächlich braucht man bei den üblichen Observablen oft gar nicht so lange zu warten, bis die Trajektorie die Energieschale einigermaßen dicht umspinnen hat.

Allerdings ist es naheliegend, dass bei einer Dichte, die nahe bei der Maximaldichte liegt, diese typischen Zeiten sehr gross werden. Man spricht von *metastabilen Zuständen*.

Bei den klassischen Spinsystemen steht uns eine natürliche Dynamik zunächst nicht zur Verfügung. Wir können statt dessen eine stochastische, *zufällige Dynamik* einführen, die sich durch eine Markovkette beschreiben läßt.

Stichworte sind hier: Monte-Carlo-Methoden, insbesondere der Metropolis-Algorithmus, die Glauber-Dynamik, und der Swendsen-Wang-Algorithmus (letzterer Algorithmus ist für Ising- und Pottsmodell besonders effektiv in der Nähe von Phasenübergängen). Eine kurze Einführung bietet das Kapitel 8 von ITZYKSON und DROUFFE [ID]; die praktischen Aspekte werden in LANDAU und BINDER [LaBi] diskutiert.

**Neuer
Ort**

14 Dynamik und Statistische Mechanik

14.1 Zeitinvarianz des Kanonischen Gibbsmaßes	169
14.2 Kanonisches und Mikrokanonisches Ensemble	172
14.3 Die Ergodenhypothese	174
14.4 Zeitskalen von Vielteilchensystemen	177
14.5 Beispiel: Das Ideale Gas	179

Die Statistische Mechanik bildet einen Rahmen für die präzise Beschreibung von Vielteilchensystemen. Trotzdem ist sie in einem gewissen Sinn keine fundamentale Theorie, sondern sie bezieht sich auf die (in der Klassischen Mechanik bzw. Quantenmechanik beschriebenen) Gesetze der Teilchendynamik.

In diesem Kapitel wird die Frage verfolgt, inwieweit sich die Voraussagen der Statistischen Mechanik dynamisch begründen lassen.

14.1 Zeitinvarianz des Kanonischen Gibbsmaßes

Am offensichtlichsten ist die Beziehung im Auftauchen der Energiefunktion $H : \Omega \rightarrow \mathbb{R}$ in der Definition des Gibbsmaßes eines Systems endlich vieler Teilchen (bzw. des Hamiltonoperators im quantenmechanischen Fall).

Während die in dieser Vorlesung vorzugsweise betrachteten klassischen Spinsysteme keine Dynamik besitzen, ist dies der Fall, wenn wir beispielsweise eine glatte Funktion $H : \Omega \rightarrow \mathbb{R}$ auf einer offenen Teilmenge $\Omega \subseteq \mathbb{R}_p^N \times \mathbb{R}_q^N$ betrachten. Diese Funktion definiert dann die *Hamiltonschen Differentialgleichungen*

$$\dot{p}_i = -\frac{\partial H}{\partial q_i} \quad , \quad \dot{q}_i = \frac{\partial H}{\partial p_i} \quad (i = 1, \dots, N) \quad (14.1)$$

auf dem Phasenraum U . Wir nehmen im Folgenden an, dass diese Differentialgleichungen erster Ordnung für alle Anfangswerte $x(0) = (p(0), q(0)) := x_0 \in \Omega$ und alle Zeiten $t \in \mathbb{R}$ eindeutig lösbar sind, und schreiben die Lösung in der Form

$$\Phi_t : \Omega \rightarrow \Omega \quad (t \in \mathbb{R}) \quad , \quad \text{oder auch} \quad (p(t, x_0), q(t, x_0)) := \Phi_t(x_0).$$

Wie man durch Einsetzen von (14.1) sieht, ist die Hamiltonfunktion H eine *Konstante der Bewegung* für den von ihr erzeugten Fluß Φ_t :

14.1 Lemma *Für alle Zeiten $t \in \mathbb{R}$ gilt $H \circ \Phi_t = H$.*

Bew.: • Zunächst verschwindet für $t = 0$ die Zeitableitung:

$$\frac{d}{dt}H \circ \Phi_t|_{t=0} = \sum_{i=1}^N \left(\frac{\partial H}{\partial q_i} \dot{q}_i + \frac{\partial H}{\partial p_i} \dot{p}_i \right) = \sum_{i=1}^N \left(\frac{\partial H}{\partial q_i} \frac{\partial H}{\partial p_i} - \frac{\partial H}{\partial p_i} \frac{\partial H}{\partial q_i} \right) = 0. \quad (14.2)$$

• Für beliebige Zeiten $t \in \mathbb{R}$ und $x \in \Omega$ gilt mit $y := \Phi_t(x)$

$$\frac{d}{dt}H \circ \Phi_t(x) = \frac{d}{ds}H \circ \Phi_s(y) |_{s=0} = 0. \quad \square$$

14.2 Beispiel Wir betrachten n klassische Teilchen der Masse $m > 0$ in d Dimensionen unter dem Einfluss eines (z.B. gravitativen oder elektrostatischen) Potentials. Es ist also $N := nd$, $\Omega := \prod_{i=1}^n \mathbb{R}_{p_i}^d \times \mathbb{R}_{q_i}^d \cong \mathbb{R}_p^N \times \mathbb{R}_q^N$ und

$$H(p, q) := \sum_{i=1}^n \frac{\|p_i\|^2}{2m} + V(q).$$

Setzen wir voraus, dass für das glatte Potential $V : \mathbb{R}_q^N \rightarrow \mathbb{R}$ gilt: $\lim_{\|q\| \rightarrow \infty} V(q) = \infty$, dann ist für jede Energie $E \in \mathbb{R}$ die Niveauläche $H^{-1}(E) \subseteq \Omega$ kompakt. Da die Hamiltonschen Gleichungen (14.1)

$$\dot{p}_i = -\nabla_{q_i} V(q) \quad , \quad \dot{q}_i = \frac{p_i}{m} \quad (i = 1, \dots, n)$$

für Anfangswerte $x_0 \in H^{-1}(E)$ auf dieser kompakten Menge verbleiben, existiert nach einem Satz aus der Theorie der gewöhnlichen Differentialgleichungen die Lösung Φ_t für alle $t \in \mathbb{R}$.

Fassen wir die rechte Seite von (14.1) in Form des Vektorfeldes

$$X_H : \Omega \rightarrow \mathbb{R}_p^N \times \mathbb{R}_q^N \quad , \quad X_H(x) := J \nabla H(x)$$

mit der schiefsymmetrischen Matrix $J := \begin{pmatrix} 0 & -\mathbb{1}_N \\ \mathbb{1}_N & 0 \end{pmatrix} \in \mathcal{M}(2N, \mathbb{R})$ zusammen, dann schreibt sich diese Differentialgleichung in der Kurzform $\dot{x} = X_H(x)$, und es gilt $\frac{d}{ds} \Phi_s(x) |_{s=0} = X_H(x)$, der Fluss ist also tangential an das *Hamiltonsche Vektorfeld* X_H . Daher gilt:

14.3 Satz (Liouville) *Das Lebesguemaß auf dem Phasenraum Ω ist invariant unter dem Fluss Φ_t , d.h. für alle Borelmengen $A \in \mathcal{B}(\Omega)$ ist*

$$\int_A dx = \int_{\Phi_t(A)} dx \quad (t \in \mathbb{R}).$$

Bew.: Wir benutzen die Transformationsformel der Integrationstheorie.

- Entsprechend muss gezeigt werden, dass für alle $x \in \Omega$ und $t \in \mathbb{R}$ gilt:

$$\frac{d}{dt} \det(D\Phi_t(x)) = 0, \quad (14.3)$$

denn mit $\det(D\Phi_0(x)) = \det(\mathbb{1}_{2N}) = 1$ folgt dann auch $\det(D\Phi_t(x)) = 1$.

- (14.3) gilt zunächst für $t = 0$, da

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \det(D\Phi_t(x)) \Big|_{t=0} &= \frac{d}{dt} \det(\mathbb{1}_{2n} + tDX_H(x)) \Big|_{t=0} \\ &= \operatorname{tr}(DX_H(x)) = \operatorname{tr}(DJ(DH(x))^t) = \operatorname{tr}(JA), \end{aligned}$$

denn die Hessematrix $A := \operatorname{Hess} H(x)$ ist symmetrisch, und es gilt

$$\operatorname{tr}(JA) = \operatorname{tr}((JA)^t) = \operatorname{tr}(A^t J^t) = -\operatorname{tr}(AJ) = -\operatorname{tr}(JA).$$

- Wegen der Gruppeneigenschaft $\Phi_{s+t} = \Phi_s \circ \Phi_t$ des Flusses ist für beliebige $t \in \mathbb{R}$ und $y := \Phi_t(x)$

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \det(D\Phi_t(x)) &= \frac{d}{ds} \det(D(\Phi_s \circ \Phi_t)(x)) \Big|_{s=0} \\ &= \frac{d}{ds} \det(D\Phi_s(y) \cdot D\Phi_t(x)) \Big|_{s=0} \\ &= \frac{d}{ds} \det(D\Phi_s(y)) \Big|_{s=0} \cdot \det(D\Phi_t(x)) = 0. \quad \square \end{aligned}$$

Um nun auf die Statistische Mechanik zurückzukommen, suchen wir nach einer Rechtfertigung für die Wahl des kanonischen Gibbsmaßes

$$\mu_\beta(A) := \frac{\int_A \exp(-\beta H(x)) dx}{\int_\Omega \exp(-\beta H(x)) dx} \quad (A \in \mathcal{B}(\Omega)) \quad (14.4)$$

für inverse Temperaturen $\beta > 0$. Wir nehmen hier an, dass $V(q)$ mit $\|q\|$ so schnell gegen Unendlich strebt, dass das Integral $\int_\Omega \exp(-\beta H(x)) dx$ endlich ist.

14.4 Satz *Das kanonische Gibbsmaß μ_β ist Φ_t -invariant:*

$$\mu_\beta(\Phi_t(A)) = \mu_\beta(A) \quad (A \in \mathcal{B}(\Omega), t \in \mathbb{R}).$$

Bew.: Da Φ_t ein Diffeomorphismus ist, gilt wegen Satz 14.3 und Lemma 14.1:

$$\begin{aligned} \int_{\Phi_t(A)} \exp(-\beta H(x)) dx &= \int_A \exp(-\beta H \circ \Phi_t(y)) |\det D\Phi(y)| dy \\ &= \int_A \exp(-\beta H \circ \Phi_t(y)) dy = \int_A \exp(-\beta H(y)) dy. \end{aligned}$$

Daraus ergibt sich die Invarianz von μ_β . □

14.5 Bemerkung Bezeichnet $\mathbb{E}_\mu(f) := \int_\Omega f d\mu$ den Erwartungswert einer Zufallsgröße $f : \Omega \rightarrow \mathbb{R}$ bezüglich eines Wahrscheinlichkeitsmaßes μ auf dem Phasenraum, dann folgt aus Satz 14.4 (falls $\mathbb{E}_\mu(|f|) < \infty$) für die Gibbsmaße

$$\mathbb{E}_{\mu_\beta}(f \circ \Phi_t) = \mathbb{E}_{\mu_\beta}(f) \quad , \quad (t \in \mathbb{R}).$$

Diese Aussage ist das klassische Analogon zu Satz 3.5 über die zeitlich Invarianz der quantenmechanischen Gibbszustände.

14.2 Kanonisches und Mikrokanonisches Ensemble

Nun läßt sich für *jede* stetige Funktion $f : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}^+$ mit $\int_\Omega f \circ H(x) dx < \infty$ analog zu (14.4) (mit $f_\beta(x) := \exp(-\beta x)$) ein Φ_t -invariantes Wahrscheinlichkeitsmaß definieren.

Zwar haben wir in Kapitel 4.3 gesehen, dass die Wahl f_β die Entropie unter der Nebenbedingung eines vorgegebenen Erwartungswertes der Energie maximiert. Dies motiviert die Wahl der μ_β durch ein Variationsprinzip.

Allerdings liegt im Kontext der Dynamik Φ_t auf Ω die Wahl einer anderen einparametrischen Familie von Wahrscheinlichkeitsmaßen, nämlich der *mikrokanonischen Maße* ν_E für Energien E nahe: Diese sind für Energiewerte $E \in H(\Omega)$ durch

$$\nu_E(A) := \frac{\int_A \delta(H(x) - E) dx}{\int_\Omega \delta(H(x) - E) dx}$$

definiert. Ist E ein regulärer Wert von H und die Niveauläche $H^{-1}(E) \subseteq \Omega$ kompakt, dann ist $0 < \int_\Omega \delta(H(x) - E) dx < \infty$ und damit ν_E wohldefiniert.

Die mikrokanonischen Maße ν_E sind wie die kanonischen Maße Φ_t -invariant. Gegenüber letzteren besitzen sie den konzeptionellen Vorteil, dass die Energie H , als Observable aufgefasst, verschwindende Varianz (2.13) besitzt:

$$\mathbb{E}_{\nu_E}(H^2) = (\mathbb{E}_{\nu_E}(H))^2 = E^2 \quad , \quad \text{also} \quad \mathbb{V}_{\nu_E}(H) = 0.$$

Dies ist eine günstige Eigenschaft, denn nach Lemma 14.1 wird ja die Energie für alle Zeiten durch die Energie der Anfangsbedingung fixiert.

Allerdings verschwindet im thermodynamischen Limes $n \rightarrow \infty$ großer Teilchenzahl typischerweise auch für μ_β die Varianz der Energie pro Teilchen H/n .

14.6 Beispiel Wählt man in Beispiel 14.2 als Potential $V(q) := \frac{1}{2}\|q\|^2$, betrachtet also den Fall von $n = N$ eindimensionalen harmonischen Oszillatoren mit Masse $m := 1$ und Energiefunktion $H(x) = \frac{1}{2}\|x\|^2$, so ergibt sich wegen der Formel $\int_0^\infty \exp(-r^2/2)r^{2k-1} dr = 2^{k-1}\Gamma(k)$ die Varianz der Energie pro Teilchen

$$\mathbb{V}_{\mu_\beta}(H/n) = \frac{1}{n\beta^2}.$$

Sind weitere Konstanten der Bewegung bekannt, dann bietet sich an, das Wahrscheinlichkeitsmaß so zu modifizieren, dass sein Träger im Phasenraum eine gemeinsame Niveaumenge dieser Funktionen ist.

14.7 Beispiel Das Potential aus Beispiel 14.2 sei von der Form

$$V(q) = \sum_{i=1}^n V_C(q_i) + \sum_{1 \leq i < j \leq n} V_W(q_i - q_j),$$

wobei das "Containerpotential" $V_C : \mathbb{R}^d \rightarrow \mathbb{R}$ die Eigenschaft $\lim_{\|q\| \rightarrow \infty} V_C(q) = \infty$ habe, während das "Wechselwirkungspotential" $V_W : \mathbb{R}^d \rightarrow \mathbb{R}$ im Gegenteil für große Abstände gegen Null gehe. Solche Potentiale V modellieren für $d = 3$ ein Gas in einem Behälter. Typischerweise ist dann die Wechselwirkung invariant unter Drehungen, d.h. $V_W(q) = \tilde{V}_W(\|q\|)$.

Nimmt man auch eine entsprechende Kugelform $V_C(q) = \tilde{V}_C(\|q\|)$ des Containers an, dann sind die Komponenten L_i des Gesamtdrehimpulses

$$L : \Omega \rightarrow \mathbb{R}^3 \quad , \quad L(p, q) := \sum_{i=1}^n q_i \times p_i \quad (14.5)$$

Konstanten der Bewegung:

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} L \circ \Phi_t(q, p)|_{t=0} &= \sum_{i=1}^n (\dot{q}_i \times p_i + q_i \times \dot{p}_i) = \sum_{i=1}^n \left(\frac{p_i}{m} \times p_i - q_i \times \nabla_{q_i} V(q) \right) \\ &= - \sum_{i=1}^n q_i \times \nabla V_C(q_i) - \sum_{1 \leq i < j \leq n} (q_i \times \nabla_{q_i} V_W(q_i - q_j) + q_j \times \nabla_{q_j} V_W(q_i - q_j)) \\ &= 0. \end{aligned}$$

Es bietet sich die Betrachtung invarianter Maße mit Träger auf Untermannigfaltigkeiten der Form

$$\{x \in \Omega \mid H(x) = E, \quad L(x) = l\}$$

an, parametrisiert durch Energie E und Wert $l \in \mathbb{R}^3$ des Drehimpulses.

14.3 Die Ergodenhypothese

Die physikalische Messung einer Observablen $f : \Omega \rightarrow \mathbb{R}$ liefert im Allgemeinen zeitabhängige Ergebnisse. Dies liegt (im Rahmen unserer klassischen Modellierung daran, dass die zu Beginn der Messung vorliegende Konfiguration $x \in \Omega$ i.Allg. keine Ruhelage ist, und daher das Messergebnis $f \circ \Phi_t(x)$ von der Zeit t abhängt. Allerdings bedingt die Trägheit der Messinstrumente eine gewisse zeitliche Mittelung mit Zeitkonstante $T > 0$, die wir z.B. dadurch modellieren können, dass wir die stetige Funktion f durch

$$\bar{f}_T := \frac{1}{T} \int_0^T f \circ \Phi_{-t} dt$$

ersetzen. Wir erwarten, dass die Funktion $t \mapsto \bar{f}_T \circ \Phi_t(x)$ weniger fluktuiert als die ursprüngliche Funktion $t \mapsto f \circ \Phi_t(x)$. Daher interessieren wir uns für den Limes $T \rightarrow \infty$. Dessen Existenz wird durch den folgenden Satz sichergestellt.

14.8 Satz (Birkhoffscher Ergodensatz) *Es sei M ein kompakter metrischer Raum, $\Phi_t : M \rightarrow M$ ($t \in \mathbb{R}$) ein messbarer Fluss und $\nu : \mathcal{B}(M) \rightarrow [0, 1]$ ein Φ_t -invariantes Wahrscheinlichkeitsmaß.*

Dann existiert für $f \in L^1(M, \nu)$ und ν -fast alle $x \in M$ der Limes

$$\boxed{\bar{f}(x) := \lim_{T \rightarrow \infty} \frac{1}{T} \int_0^T f \circ \Phi_{-t}(x) dt \quad , \text{ und } \bar{f} \in L^1(M, \nu).}$$

Weiter ist $\mathbb{E}_\nu(\bar{f}) = \mathbb{E}_\nu(f)$ und $\bar{f} \circ \Phi_t = \bar{f}$ ($t \in \mathbb{R}$).

Der Beweis findet sich (für den zeitdiskreten Fall $t \in \mathbb{Z}$) im Skript "Mathematische Physik I: Klassische Mechanik".

Wir können (durch Restriktion von f auf $M := H^{-1}(E)$) den Satz auf die mikrokanonischen Maße ν_E anwenden.

Im physikalischen Kontext wird \bar{f} oft als *Zeitmittel*, $\mathbb{E}_\nu(f)$ als *Raummittel* von f verstanden. Dabei identifiziert man Letzteres mit der konstanten Funktion $\mathbb{E}_\nu(f) \cdot \mathbb{1}_M$ auf M .

Ergodenhypothese: Raummittel ist gleich Zeitmittel.

Diese auf Boltzmann zurückgehende Arbeitshypothese stellt eine teilweise Rechtfertigung der Verwendung mikrokanonischer Maße in der statistischen Mechanik dar. Ist nämlich für ein dynamisches System die Ergodenhypothese erfüllt, dann stimmen die gemessenen Daten $\bar{f}(x)$ (ν -fast sicher) mit den berechneten Daten $\mathbb{E}_\nu(f)$ überein.

14.9 Definition *Das messbare dynamische System $(M, \mathcal{B}(M), \nu, \Phi_t)$ heißt **ergodisch**, wenn alle Φ_t -invarianten Funktionen $f \in L^1(M, \nu)$ fast überall konstant (nämlich gleich $\mathbb{E}_\nu(f)$) sind.*

Die Frage ist nun, ob das jeweils untersuchte Vielteilchensystem der klassischen Mechanik eine bezüglich des mikrokanonischen Maßes ν_E ergodische Dynamik besitzt.

14.10 Beispiel Wie wir am Beispiel 14.7 sehen, muss dies nicht der Fall sein.

- Denn aus Symmetriegründen ist das *Raummittel* $\mathbb{E}_{\nu_E}(L)$ des Gesamtdrehimpulses 14.5 gleich Null, die Zeitumkehrabbildung

$$T : \Omega \rightarrow \Omega \quad , \quad T(p, q) := (-p, q)$$

besitzt nämlich die Eigenschaften $H \circ T = H$ und $L \circ T = -L$.

- Für kugelförmige Container ist aber $L \neq 0$ Konstante der Bewegung, also gleich seinem *Zeitmittel* \bar{L} .

Zwar gibt es Vielteilchensysteme, von denen man vermutet, dass sie ergodisch sind. Allerdings sind Beweise außerordentlich schwierig zu führen.

14.11 Beispiel Ein Beispiel bildet das System von n Kugeln vom gleichen Radius, die sich in einem (z.B. würfelförmigen) Gebiet bewegen und an dessen Rand und aneinander nach dem Gesetz "Ausfallswinkel = - Einfallswinkel" reflektiert werden. Dies ist ein einfaches Modell eines realen Gases; siehe SIMÁNYI, SZÁSZ [Si, Sz, Sz2].

Die obige Definition von Ergodizität beschreibt diese dynamische Eigenschaft nur indirekt, über ihre Auswirkung auf die Mittelungseigenschaft von Phasenraumfunktionen. Anschaulicher ist vielleicht das folgende Kriterium:

14.12 Satz Ein messbares dynamisches System $(M, \mathcal{B}(M), \nu, \Phi_t)$ ist genau dann ergodisch, wenn für alle messbaren Teilmengen $A \in \mathcal{B}(M)$ des Phasenraums M gilt:

$$A \text{ ist } \Phi_t\text{-invariant} \quad \iff \quad \nu(A) \in \{0, 1\}.$$

Im Teil I der Vorlesung wird Ergodizität sogar durch diese Eigenschaft definiert, und dann die Äquivalenz zur Konstanz aller (L^2-) Funktionen nachgewiesen.

Falls nun Ergodizität vielleicht keine typische Eigenschaft von n -Teilchensystemen ist, könnte man hoffen, dass diese vielleicht eine große *ergodische Komponente*, d.h. eine fluss-invariante messbare Teilmenge $A_n \subseteq M_n$ mit $\nu_n(A_n) > 0$, auf der der Fluss bezüglich des restringierten Wahrscheinlichkeitsmaßes $\frac{(\nu_n)|_{A_n}}{\nu_n(A_n)}$ ergodisch ist. Man könnte beispielsweise hoffen nachzuweisen, dass im thermodynamischen Limes $n \rightarrow \infty$ eine solche Komponente A_n mit $\nu_n(A_n) \nearrow 1$ existiert.

Aber selbst diese abgeschwächte Forderung ist, wie Beispiel 14.10 zeigt, nicht immer erfüllt.

Ob sie für *typische* Systeme der statistischen Mechanik erfüllt ist, lässt sich schon daher nicht beantworten, weil man dazu erst einmal die Klasse aller solcher Systeme definieren müsste. Dies ist nur unter extrem vereinfachenden und wenig realistischen Bedingungen möglich:

14.13 Beispiel Für $n \in \mathbb{N}$ betrachten wir auf dem "Phasenraum" $M \equiv M_n := \{1, 2, \dots, n\}$ durch eine beliebige Permutation $\pi \in S_n$ gegebene Dynamik

$$\Phi_t(x) := \pi^t(x) \quad (x \in M, t \in \mathbb{Z}).$$

Das einzige für alle Permutationen π invariante Wahrscheinlichkeitsmaß $\nu \equiv \nu_n$ auf M ist das normierte zählende Maß, d.h. $\nu(A) := |A|/n$.

Die Orbits von Φ_t sind die Zykeln in der Zykeldarstellung von π . Beispielsweise besitzt Φ_t für die Transposition $\pi \in S_3$, $\pi(1) = 2$, $\pi(2) = 1$, $\pi(3) = 3$ die beiden Orbits $\{1, 2\}$ und $\{3\}$.

Also sind die Φ_t -invarianten Teilmengen von M beliebige Vereinigungen von Orbits.

1. Da aus $A \subseteq M$ und $\nu(A) = 0$, $A = \emptyset$, aus $\nu(A) = 1$ aber $A = M$ folgt, ist Φ_t genau dann ergodisch, wenn π aus nur einem Zykel besteht. Dies ist für genau $(n-1)!$ der $n!$ Permutationen $\pi \in S_n$ der Fall, lässt man nämlich den Zykel willkürlich bei $1 \in M$ beginnen, kann man die Reihenfolge der $n-1$ Nachfolger frei wählen.

Wir sehen also, dass nur ein Anteil $1/n$ der durch die Wahl von $\pi \in S_n$ fixierten Dynamiken ergodisch ist. Diese speziellen Permutationen wurden übrigens von Boltzmann zum Modell für das Verhalten von Vielteilchensystemen erhoben.

2. Da nun die ergodischen Komponenten von Φ_t gerade die Zykeln von π sind, ist eine natürliche Frage die nach der typischen Größe dieser Komponenten – gemittelt über alle durch die $\pi \in S_n$ erzeugten Dynamiken Φ_t .

Dazu fragen wir zunächst nach der Wahrscheinlichkeit W_k , dass ein vorgegebenes $x \in M$ zu einem Zykel der Größe $k \in \{1, \dots, n\}$ gehört:

$$W_k := \frac{|\{\pi \in S_n | l(x, \pi) = k\}|}{|S_n|}$$

mit der Zykellänge $l(x, \pi) := |\{\pi^t(x) | t \in \mathbb{Z}\}|$. Offensichtlich hängt W_k nicht von der Wahl von x ab, und wir wählen $x = 1$. Die restlichen $k-1$ Elemente des Zyklus $Z \subseteq M$ von x sind aus der Menge $M \setminus \{x\}$ frei wählbar, es gibt also $\binom{n-1}{k-1}$ Wahlen. Die Reihenfolge der Elemente von $Z \setminus \{1\}$ im Zykel ist ebenfalls

frei wählbar, was $(k - 1)!$ Möglichkeiten ergibt. Auf der Menge $M \setminus Z$ gibt es $(n - k)!$ Permutationen. Es ergibt sich:

$$W_k = \frac{\binom{n-1}{k-1} (k-1)! (n-k)!}{n!} = \frac{(n-1)!}{n!} = \frac{1}{n}.$$

Die Wahrscheinlichkeit der Zugehörigkeit zu einem Zykel der Größe k ist also unabhängig von k . Der Erwartungswert der Zykelgröße ist damit

$$E_n := \sum_{k=1}^n kW_k = \frac{1}{n} \sum_{k=1}^n k = \frac{n+1}{2},$$

im "thermodynamischen Limes" $n \rightarrow \infty$ ist x also im Mittel in einem Zykel der halben Phasenraumgröße enthalten.

Dies ist inkompatibel mit der typischen Existenz einer "großen π -ergodischen Komponente" $A_n \subseteq M_n$ mit $\lim_{n \rightarrow \infty} \nu_n(A_n) = 1$. Dabei wird bei der Definition der Begriffes "typische Dynamik" die Gleichverteilung auf dem Raum S_n zugrundegelegt.

14.4 Zeitskalen von Vielteilchensystemen

Im letzten Abschnitt haben wir uns auf den Standpunkt gestellt, dass in physikalischen Messungen statt der Observablen f die über eine Zeitspanne der Länge $T > 0$ gemittelte Observable \bar{f}_T beobachtet wird, und dass T so groß ist, dass für typische Phasenraumpunkte $x \in M$ dieser Mittelwert $\bar{f}_T(x)$ seinem Limes $\bar{f}(x)$ nahe kommt.

Wir fragen uns jetzt, ob diese Annahme gerechtfertigt ist und orientieren uns zunächst an unserem Permutationsbeispiel:

14.14 Beispiel Für eine zyklische Permutation $\pi \in S_n$ und eine Observable $f : M \rightarrow \mathbb{R}$ ist $\bar{f}(x) = \frac{1}{n} \sum_{y \in M} f(y)$, also unabhängig von $x \in M$.

Wir nehmen der Einfachheit halber an, dass π von der Form $\pi(x) = x + 1 \pmod{n}$ ist (dies können wir immer durch Umnummerieren des Phasenraums mit der Permutation $\sigma \in S_n$, $\sigma(t) := \pi^{t-1}(1)$ erreichen). Als Nächstes setzen wir $m := \lfloor T/n \rfloor$, sodass $T = mn + r$ mit Rest $r \in \{0, \dots, n-1\}$. Damit ist

$$\bar{f}_T(x) = \frac{1}{T} \sum_{i=0}^{T-1} f(x+i) = \frac{m}{T} \sum_{i=0}^{n-1} f(x+i) + \frac{1}{T} \sum_{i=0}^{r-1} f(x+i) = \frac{mn}{T} \bar{f} + \frac{1}{T} \sum_{i=0}^{r-1} f(x+i),$$

also mit $\|g\|_{\max} := \max_{y \in M} |g(y)|$

$$\begin{aligned} |\bar{f}_T(x) - \bar{f}| &= \left| \frac{r}{T} \bar{f} - \frac{1}{T} \sum_{i=0}^{r-1} f(x+i) \right| \\ &= \frac{1}{T} \left| \sum_{i=0}^{r-1} (f(x+i) - \bar{f}) \right| = \frac{1}{T} \left| \sum_{i=r}^{n-1} (f(x+i) - \bar{f}) \right| \\ &\leq \frac{\min(r, n-r)}{T} \|f - \bar{f}\|_{\max} \leq \min\left(1, \frac{n}{2T}\right) \|f - \bar{f}\|_{\max}. \end{aligned}$$

Diese Abschätzung ist im wesentlichen optimal. Das sieht man am Beispiel gerader $n \in \mathbb{N}$ und $T = (m + \frac{1}{2})n$,

$$f(x) = 1 \text{ für } x \in \{0, \dots, n/2 - 1\} \quad , \quad f(x) = -1 \text{ für } x \in \{n/2, \dots, n-1\},$$

(also $\|f\|_{\max} = 1$ und $\bar{f} = 0$), wenn man $x := 0$ einsetzt.

Wir müssen also i.Allg. über eine Zeitspanne T mitteln, die groß gegenüber der Kardinalität $n = |M|$ des Phasenraumes ist, wenn wir eine gute Approximation des Zeitmittels \bar{f} erreichen wollen.

In physikalischen Vielteilchensystemen ist der Phasenraum nicht diskret, sodass sich die obige Argumentation nicht direkt übertragen lässt. Allerdings lässt sich zeigen, dass ein Zustand von n quantenmechanischen Teilchen für d Raumdimensionen (z.B. $d = 3$) ein Phasenraumvolumen von asymptotisch $(2\pi\hbar)^{nd}$ einnimmt. Diskretisiert man den Phasenraum entsprechend, dann kommt man durch analoge Überlegungen zu erforderlichen Mittelungszeiten T , die das bisherige Alter des Universums um ein Vielfaches übersteigen (und das für weit weniger als $n = 10^{23}$ Teilchen).

Zwischenbilanz: Weder Ergodenhypothese noch Zeitlimes scheinen zur Begründung unserer Argumentationskette

$$\bar{f}_T(x) \approx \bar{f}(x) \approx \mathbb{E}_{\nu_E}(f) \quad (x \in H^{-1}(E))$$

zugunsten der Statistischen Mechanik zur Verfügung zu stehen.

Andererseits stimmen ihre Voraussagen i.Allg. ausgezeichnet mit dem Experiment überein.

Um die Ursachen dieser scheinbaren Diskrepanz besser zu verstehen, wenden wir uns nun den Observablen f zu. Mathematisch gesehen können wir alle (z.B. stetigen) f messen. In der Realität sind aber nur wenige Observablen von Interesse, insbesondere solche, deren Wert unabhängig von der Nummerierung der n Teilchen ist, die also invariant unter der Wirkung der symmetrischen Gruppe S_n auf dem Phasenraum sind.

Beispiele sind etwa die Energie H_n oder die Komponenten des Gesamtdrehimpulses L_n .

Bei diesen Beispielen fällt weiter auf, dass sie im Fall von L_n als Summe von Termen geschrieben werden können, die nur von den Koordinaten eines Teilchens abhängen: $L_n(p, q) = \sum_{i=1}^n q_i \times p_i$, während im Fall von H_n die einzelnen Terme höchstens von den Koordinaten zweier Teilchen abhängen: Solche Phasenraumfunktionen f sind von sehr spezieller Struktur, und es verwundert nicht, wenn bei ihnen die für eine gute Approximation von \bar{f} durch \bar{f}_T benötigte Zeit T nicht mit n divergiert.

Im nächsten Abschnitt werden wir auch Observablen f kennen lernen, für die (ν_E -fast überall) Zeitmittel gleich Raummittel ist, obwohl der zugrunde liegende Fluss keineswegs ergodisch ist.

14.5 Beispiel: Das Ideale Gas

Das in Beispiel 14.7 beschriebene n -Teilchensystem wird *Ideales Gas* genannt, wenn das Wechselwirkungspotential V_W gleich Null ist. Damit ist die Hamiltonfunktion von der Form

$$H_n(p, q) = \sum_{i=1}^n H_1(p_i, q_i) \quad \text{mit} \quad H_1(p_i, q_i) = \frac{\|p_i\|^2}{2} + V_C(q_i),$$

die Gasatome bewegen sich also unabhängig voneinander. Insbesondere ist für $n \geq 2$ Teilchen die Bewegung auf $H^{-1}(E)$ *nicht ergodisch* bezüglich ν_E , denn die Energie $H_1(p_i, q_i)$ des i -ten Teilchens ist eine von der Gesamtenergie $H_n(p, q)$ unabhängige Konstante der Bewegung.

Um nun die Diskussion weiter zu vereinfachen, ersetzen wir das Containerpotential V_C durch den würfelförmigen Container $C := [0, 2]^d \subseteq \mathbb{R}^d$, und nehmen an, dass die Gasatome am Rand ∂C nach dem Gesetz "Ausfallswinkel = - Einfallswinkel" reflektiert werden.³¹

Wir interessieren uns nun für die Gleichverteilungseigenschaften des Gases auf den Container, z.B. die Zahl der Gasatome in der linken Containerhälfte

$$C_L := [0, 1] \times [0, 2]^{d-1} \quad \text{bzw. der rechten Hälfte} \quad C_R := C - C_L.$$

Intuitiv würde man vielleicht erwarten, dass sich die meiste Zeit in C_L etwa $n/2$ Atome befinden, mit einer Schwankung der Größenordnung \sqrt{n} . Ganz unabhängig von den Anfangsbedingungen kann das aber nicht gelten:

³¹Diese Vorschrift lässt sich auch auf die Reflektion an den Kanten und Ecken von ∂C stetig fortsetzen!

14.15 Beispiel Zum Zeitpunkt 0 sollen sich alle n Teilchen in C_L befinden und mit Geschwindigkeit 1 nach rechts bewegen. Dann stellt sich dieser Zustand nach $4, 8, 12, \dots$ Zeiteinheiten wieder her.

Immerhin können wir die folgende Aussage beweisen. Es sei $\tilde{C} \subseteq C$ eine jordanmessbare Teilmenge des Containers und

$$\hat{p} := \frac{\text{Vol}(\tilde{C})}{\text{Vol}(C)} \quad , \quad \hat{q} := 1 - \hat{p}$$

(für $\tilde{C} := C_L$ ist also $\hat{p} = 1/2$). Ferner sei

$$\Omega_1^{(d)} := \prod_{k=1}^d \Omega_1^{(1)}$$

der Einteilchenphasenraum in d Dimensionen mit $\Omega_1^{(1)} := (\mathbb{R} \times [0, 2]) / \sim$. Dabei werden an den Randpunkten gespiegelte Impulse identifiziert: $(p, x) \sim (-p, x)$, falls $x \in \{0, 2\}$.

$\Omega_n^{(d)} := \prod_{i=1}^n \Omega_1^{(d)}$ ist der n -Teilchenphasenraum.

14.16 Satz Für Energie $E > 0$ ist für ν_E -fast alle Anfangswerte der Zeitanteil, für den sich in \tilde{C} genau m der n Teilchen aufhalten, gleich $\binom{n}{m} \hat{p}^m \hat{q}^{n-m}$.

Bemerkung: Damit halten sich in der linken Containerhälfte die meiste Zeit zwischen $\frac{n}{2} - \sqrt{n}$ und $\frac{n}{2} + \sqrt{n}$ Teilchen auf.

Bew.: Die Form der Bewegung wird einfacher, wenn man zunächst die Anfangsbedingungen in der Form $x = (p, q) \in \mathbb{R}^{nd} \times [0, 2]^{nd}$ notiert, das heißt, alle Impuls- bzw. Ortskomponenten aller Teilchen hintereinander schreibt, und dann für p die bedingt periodische Bewegung

$$\Psi_t^{(p)} : \mathbb{T} \rightarrow \mathbb{T} \quad , \quad \Psi_t^{(p)}(q) = q + tp \quad (t \in \mathbb{R})$$

auf dem nd -dimensionalen Torus

$$\mathbb{T} := (\mathbb{R}/4\mathbb{Z})^{nd} \cong [0, 4]^{nd} / \sim$$

betrachtet. Hierbei ist der Torus mit dem Würfel $[0, 4]^{nd}$ zu identifizieren, wenn die Äquivalenzrelation gegenüberliegende Randpunkte identifiziert:

$$(q_1, \dots, q_{i-1}, 0, q_{i+1}, \dots, q_{nd}) \sim (q_1, \dots, q_{i-1}, 4, q_{i+1}, \dots, q_{nd}) \quad (i = 1, \dots, nd).$$

Denn es gilt für den Fluss auf $\Omega_n^{(d)}$:

$$\Phi_t(p, q) = \left(P(p, \Psi_t^{(p)}(q)), Q(\Psi_t^{(p)}(q)) \right) \quad (14.6)$$

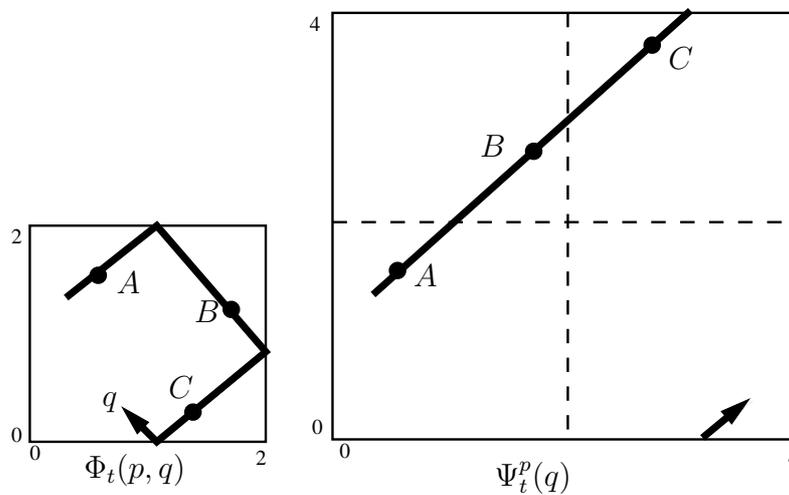
mit

$$Q_i(q) := \begin{cases} q_i & , q_i \in [0, 2] \\ 4 - q_i & , q_i \in [2, 4] \end{cases}$$

und

$$P_i(p, q) := \begin{cases} p_i & , q_i \in [0, 2] \\ -p_i & , q_i \in [2, 4] \end{cases} .$$

Geometrisch wird also ein Spiegelungsprinzip benutzt, was für $n = 1$ Teilchen in $d = 2$ Dimensionen veranschaulicht werden kann:



Nun ist die bedingt-periodische Bewegung $\Psi_t^{(p)}$ auf dem Torus \mathbb{T} genau dann ergodisch (bezüglich des invarianten Maßes dq auf \mathbb{T}), wenn der konstante Richtungsvektor $p \in \mathbb{R}^{nd}$ *rational unabhängig* ist, d.h.

$$\langle p, m \rangle \neq 0 \quad (m \in \mathbb{Z}^{nd} \setminus \{0\}) \quad (14.7)$$

gilt. Dies ist für Energie $E > 0$ für fast alle³² Impulse $p \in \mathbb{R}^{nd}$ vom Betrag $\|p\| = \sqrt{2E}$ der Fall, und damit für ν_E -fast alle Anfangsbedingungen.³³

Ist nun der Volumenanteil von $\tilde{C} \subseteq C$ gleich $\hat{p} = \frac{\text{Vol}(\tilde{C})}{\text{Vol}(C)}$, dann ist der Volumenanteil von

$$\tilde{C}_{n,m} := \{(q_1, \dots, q_n) \in C^n \mid \exists I \subseteq \{1, \dots, n\} \text{ mit } |I| = m, q_i \in \tilde{C} \Leftrightarrow i \in I\}$$

gleich

$$\frac{\text{Vol}(\tilde{C}_{n,m})}{\text{Vol}(C^n)} = \binom{n}{m} \hat{p}^m \hat{q}^{n-m} .$$

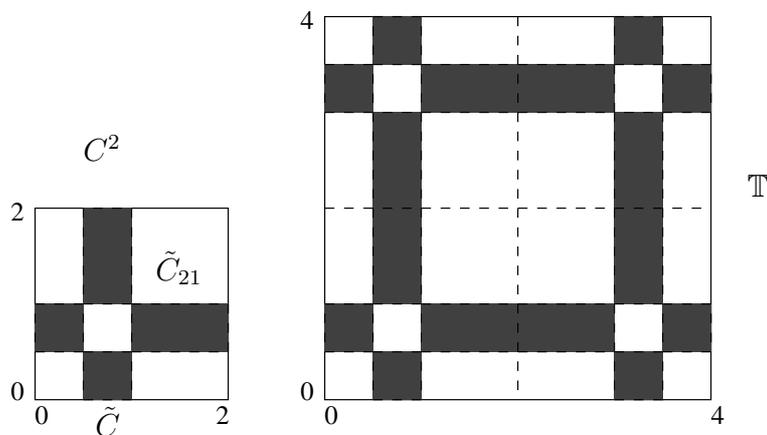


Abbildung 14.1: Links: $\tilde{C}_{2,1} \subseteq C^2$ für $n = 2$ Teilchen in $d = 1$ Dimensionen und ein Intervall $\tilde{C} \subseteq C$. Rechts: Urbild von $\tilde{C}_{2,1}$ in \mathbb{T} bezüglich der Projektion (14.6).

Den gleichen Volumenanteil besitzt aber das Urbild von $\tilde{C}_{n,m}$ bezüglich der Projektion $Q : \mathbb{T} \rightarrow [0, 2]^{nd}$. □

Von dieser Diskussion können wir nun mehrerlei lernen:

1. Für unsere speziellen Observablen (lokale Dichte des Idealen Gases im Gebiet \tilde{C}) ist das Zeitmittel gleich dem Raummittel, ohne dass die Dynamik Φ_t ergodisch wäre.
2. Ebenso zeigt eine genauere Analyse, dass die Zeit, die wir etwa warten müssen, bis sich ein ungefähres Zeitmittel eingestellt hat, in diesem Fall unabhängig von der Teilchenzahl n ist.
3. Für typische Anfangsbedingungen wird es zwar immer wieder vorkommen, dass sich alle Teilchen gleichzeitig in der linken Containerhälfte befinden, aber dies nur kurzfristig, und die Zeiten zwischen solchen Ereignissen wachsen exponentiell in n . Für makroskopische Situationen ($n \sim 10^{23}$) wird die Rückkehrzeit in die linke Containerhälfte länger als das Alter des Universums, und daher wurde ein derartiger Vorgang noch nie beobachtet.
4. *Reversibel* nennt man eine Dynamik Φ_t im Phasenraum Ω , wenn bezüglich der Abbildung

$$T : \Omega \rightarrow \Omega \quad , \quad (p, q) \mapsto (-p, q)$$

³²bezüglich des dreihinvarianten Wahrscheinlichkeitsmaßes auf der Sphäre

³³Beweis: Siehe Kapitel 34 der Vorlesung "Mathematische Physik I". Bedingung (14.7) impliziert, dass die n Atome sich unsynchronisiert durch den Container bewegen.

gilt: $\Phi_{-t} = T \circ \Phi_t \circ T$ (man nennt T oft die *Zeitumkehrabbildung*). Die Hamiltonsche Bewegung im Potential ist (im Gegensatz zur Bewegung im Magnetfeld) reversibel.

Dass man zwar beobachten kann, wie ein sich ursprünglich in C_L befindliches Gas auf den ganzen Container ausbreitet, jedoch nicht auf den umgekehrten Prozess, liegt *nicht* an einer makroskopischen Irreversibilität der Dynamik, sondern am Problem der *Anfangsbedingungen*. Denn während man das Gas (etwa durch einen Kolben) leicht in die linke Containerhälfte pressen kann, ist es praktisch unmöglich, Anfangsbedingungen zu präparieren, die z.B. nach einer Sekunde zu einer spontanen Zusammenziehung des Gases in C_L führen würden. Dazu müsste man nämlich ortsabhängig die Geschwindigkeit der Gasatome fixieren.

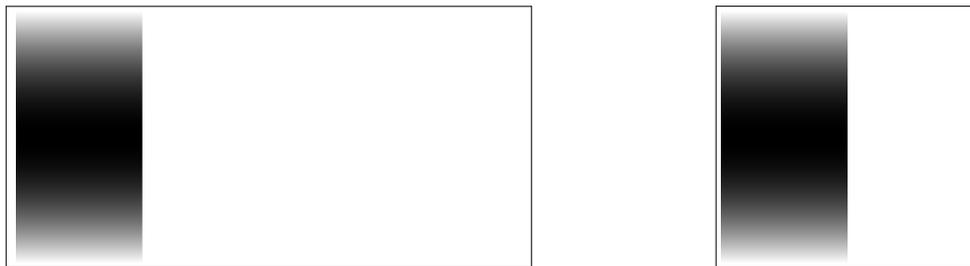


Abbildung 14.2: Phasenraumdichte des idealen Gases im Container (Zeit $t = 0$). Links: Phasenraum $\mathbb{R} \times (\mathbb{R}/4\mathbb{Z})$. Rechts: Phasenraum $\mathbb{R} \times [0, 2]$

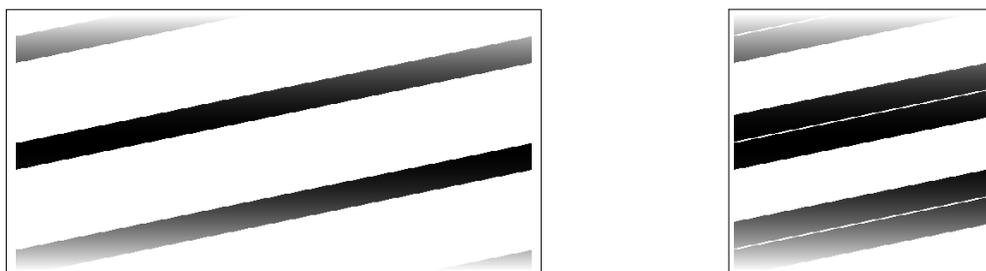


Abbildung 14.3: Phasenraumdichte des idealen Gases im Container (Zeit $t = 4.8$). Links: Phasenraum $\mathbb{R} \times (\mathbb{R}/4\mathbb{Z})$. Rechts: Phasenraum $\mathbb{R} \times [0, 2]$

15 Quantenmechanische ideale Gase

15.1 Zweitquantisierung	184
15.2 Das ideale Gas	188
15.3 Das ideale Fermigas	191
15.4 Das ideale Bosegas	193

Heuristisch nennen wir ein (klassisches oder quantenmechanisches) Vielteilchensystem *ideal*, wenn seine Gesamtenergie die Summe der Energien der einzelnen Teilchen ist, es also keine Wechselwirkung zwischen den Teilchen gibt.

Allerdings gibt es neben einer solchen energetischen noch eine subtilere zweite – durch die Symmetrieeigenschaften unter Permutationen der Teilchen bestimmte – Form der Wechselwirkung zwischen den quantenmechanischen Teilchen. Wie wir sehen werden, führt diese im Fall eines idealen Gases von so genannten Bosonen zu einem Phasenübergang.

15.1 Zweitquantisierung

*“First quantization is a mystery, but second quantization is a functor!”
(Edward Nelson)*

Wir wissen aus Kapitel 3, dass die Angabe eines selbstadjungierten Operators $H = H^*$ auf einem \mathbb{C} -Hilbertraum $(h, \langle \cdot, \cdot \rangle)$ auf der Observablenalgebra $B(h)$ eine durch

$$t \mapsto O_t := \exp(iHt) O \exp(-iHt) \quad (t \in \mathbb{R}, O \in B(h)) \quad (15.1)$$

beschriebene Zeitevolution fixiert. Unter Voraussetzung der Endlichkeit der Zustandssumme $Z(\beta) := \text{tr}(\exp(-\beta H))$ wird für inverse Temperatur $\beta > 0$ durch die Dichtematrix

$$\rho_\beta := \frac{\exp(-\beta H)}{Z(\beta)}$$

ein Zustand auf $B(h)$ definiert. Es soll entsprechend zunächst ein Hilbertraum $(h_n, \langle \cdot, \cdot \rangle_n)$ von n Teilchen definiert werden, und auf diesem Hilbertraum ein Operator H_n , der für jedes dieser Teilchen eine H entsprechende Dynamik der Form (15.1) auf h_n ergibt.

Es liegt nahe, diesen *n-Teilchen-Hilbertraum* als n -faches Tensorprodukt

$$h_n := h^n := h \otimes \dots \otimes h \quad (n \in \mathbb{N})$$

anzusetzen, mit durch

$$\langle f_1 \otimes \dots \otimes f_n, g_1 \otimes \dots \otimes g_n \rangle_n := \prod_{k=1}^n \langle f_k, g_k \rangle \quad (f_k, g_k \in h) \quad (15.2)$$

gegebenem Skalarprodukt. Ist dabei $h = L^2(M, \mu)$, also der Raum der bezüglich des Maßes μ auf M quadratintegrierbaren Funktionen $f : M \rightarrow \mathbb{C}$, dann ist

$$h_n = L^2(M \times \dots \times M, \mu \otimes \dots \otimes \mu),$$

mit Produktmaß $\mu \otimes \dots \otimes \mu$.

Nun lässt sich nicht jede Funktion $F : M \times \dots \times M \rightarrow \mathbb{C}$ als $F(x_1, \dots, x_n) = \prod_{k=1}^n f_k(x_k)$ darstellen, aber immerhin als konvergente Reihe solcher Produktfunktionen. Deshalb reicht die Angabe von (15.2) aus, das Skalarprodukt auf h_n zu fixieren, wenn man es bilinear (genauer: sesquilinear!) fortsetzt.

Ebenso können wir den n -Teilchenoperator H_n auf h_n durch

$$H_n(f_1 \otimes \dots \otimes f_n) := \sum_{k=1}^n f_1 \otimes \dots \otimes f_{k-1} \otimes (H f_k) \otimes f_{k+1} \otimes \dots \otimes f_n$$

definieren.

Dieser Ansatz führt in der Quantenmechanik dann zum Erfolg, wenn die n Teilchen an voneinander verschiedenen Orten lokalisiert sind, wie z.B. die Spins an Gitterpunkten.

Ist dies aber nicht der Fall, muss man, wie durch Vergleich mit Experimenten festgestellt wurde, den n -Teilchen-Hilbertraum modifizieren, und zwar je nachdem, ob der Spin der n gleichartigen Teilchen ein ganzzahliges oder halbzahliges Vielfaches des Planckschen Wirkungsquantums \hbar ist³⁴.

Im ersten Fall nennt man die Teilchen *Bosonen* (Beispiel: die Photonen), im zweiten Fall *Fermionen* (Beispiel: die Elektronen, Protonen und Neutronen). Die modifizierten n -Teilchen-Hilberträume h_n^\pm sind dann Unterräume von h_n , und zwar

- für Bosonen $h_n^+ := P_n^+(h_n)$ mit der durch

$$P_n^+(f_1 \otimes \dots \otimes f_n) := \frac{1}{n!} \sum_{\pi \in S_n} f_{\pi(1)} \otimes \dots \otimes f_{\pi(n)}$$

gegebenen Projektion auf h_n ,

³⁴Eine mathematische Begründung dieses Zusammenhangs zwischen Spin und Statistik findet man in Kapitel 4 des Buches [StWi] von STREATER und WIGHTMAN.

Dieser Zusammenhang ergibt sich für relativistische Theorien in drei Raumdimensionen. Es führt also nicht zu Widersprüchen, wenn wir im Folgenden den gleichen Ein-Teilchen-Operator bosonisch *und* fermionisch zweitquantisieren.

- für Fermionen $h_n^- := P_n^-(h_n)$, mit der Projektion

$$P_n^-(f_1 \otimes \dots \otimes f_n) := \frac{1}{n!} \sum_{\pi \in S_n} \text{sign}(\pi) f_{\pi(1)} \otimes \dots \otimes f_{\pi(n)}.$$

15.1 Aufgabe Zeigen Sie:

1. $P_n^\pm : h_n \rightarrow h_n$ sind (orthogonale) Projektionen.
2. Ist $\ell := \dim(h) < \infty$, dann ist

$$\dim(h_n) = \ell^n \quad , \quad \dim(h_n^-) = \binom{\ell}{n} \quad \text{und} \quad \dim(h_n^+) = \binom{\ell + n - 1}{n}.$$

Die Operatoren H_n^\pm auf h_n^\pm werden durch lineare Fortsetzung von

$$H_n^\pm P_n^\pm(f_1 \otimes \dots \otimes f_n) := P_n^\pm H_n(f_1 \otimes \dots \otimes f_n)$$

definiert.

Im Sinne der statistischen Mechanik ist es bequemer, mit dem großkanonischen Ensemble, also variabler Teilchenzahl zu arbeiten, siehe Seite 43. Daher definiert man als Mehrteilchen-Hilbertraum den *Fock-Raum*

$$\mathcal{F}(h) := \bigoplus_{n \in \mathbb{N}_0} h_n \quad , \quad \text{mit} \quad h_0 := \mathbb{C}.$$

Ein Vektor $v \in \mathcal{F}(h)$ ist also eine Folge $v = (v_n)_{n \in \mathbb{N}_0}$ von Vektoren $v_n \in h_n$, und das Skalarprodukt ist durch

$$\langle v, w \rangle := \sum_{n=0}^{\infty} \langle v_n, w_n \rangle_n \quad (v, w \in \mathcal{F}(h))$$

definiert.

Die *bosonischen* bzw. *fermionischen* Fock-Räume sind die durch die Projektoren $P^\pm := \bigoplus_{n \in \mathbb{N}_0} P_n^\pm$ (mit $P_0^\pm := 1$) auf $\mathcal{F}(h)$ gegebenen Unterräume

$$\mathcal{F}^\pm(h) := P^\pm \mathcal{F}(h).$$

- Die durch P^+ vermittelte Symmetrie heißt *Bose-Einstein-Statistik*,
- die von P^- auf $\mathcal{F}^-(h)$ heißt *Fermi-Dirac-Statistik*,
- während dem Fock-Raum $\mathcal{F}(h)$ die *Boltzmann-Statistik* unterscheidbarer Teilchen entspricht.

Einem selbstadjungierten Operator H auf dem Ein-Teilchen-Hilbertraum h ordnet man den selbstadjungierten Operator

$$d\Gamma(H) := \overline{\bigoplus_{n \in \mathbb{N}_0} H_n} \quad (\text{mit } H_0 := 0)$$

auf $\mathcal{F}(H)$ zu³⁵. Dabei wendet man diesen zunächst auf den in $\mathcal{F}(h)$ dichten Unterraum der Vektoren

$$\{v = (v_n)_{n \in \mathbb{N}_0} \in \mathcal{F}(h) \mid \exists m_0 \forall m \geq m_0 : v_m = 0\}$$

an und schließt danach den Definitionsbereich $D(d\Gamma(H))$ ab.

Wir beachten, dass wir bei Bedarf h als Unterraum von $\mathcal{F}(h)$ auffassen können, und dass dann gilt:

$$d\Gamma(H)|_h = H. \quad (15.3)$$

15.2 Beispiel Es sei $H := \mathbb{1}$. Dann ist $N := d\Gamma(\mathbb{1})$ der auf dem Definitionsbereich

$$D(N) := \left\{ v = (v_n)_{n \in \mathbb{N}_0} \in \mathcal{F}(h) \mid \sum_{n \in \mathbb{N}_0} n^2 \|v_n\|_n^2 < \infty \right\}$$

definierte selbstadjungierte Operator mit Spektrum

$$\text{spec}(N) = \mathbb{N}_0$$

und Eigenvektoren $v \in \left(\bigoplus_{n=0}^{k-1} 0 \right) \oplus v_k \oplus \left(\bigoplus_{n=k+1}^{\infty} 0 \right)$, $v_k \in h_k \setminus \{0\}$ zum Eigenwert $k \in \mathbb{N}_0$. Daher heißt der Operator *Teilchenzahloperator*.

15.3 Aufgabe Zeigen Sie: Ist $\ell := \dim(h) \in \mathbb{N}$, dann ist

1. für die bosonischen bzw. fermionischen Teilchenzahloperatoren $N^\pm := N|_{\mathcal{F}^\pm(h)}$

$$\text{spec}(N^-) = \{0, \dots, \ell\} \quad \text{aber} \quad \text{spec}(N^+) = \mathbb{N}_0.$$

³⁵Diese gebräuchliche Notation wird ergänzt durch die Zuordnung eines unitären Operators

$$\Gamma(U) := \sum_{n \in \mathbb{N}_0} U_n \quad \text{mit} \quad U_n : h_n \rightarrow h_n, \quad U_n(f_1 \otimes \dots \otimes f_n) := (U f_1) \otimes \dots \otimes (U f_n)$$

auf $\mathcal{F}(h)$ zum unitären Operator U auf h . Es gilt dann für selbstadjungierte H auf h :

$$\exp(i d\Gamma(H)) = \Gamma(\exp(iH)).$$

2. für die bosonische bzw. fermionische Zweitquantisierung $P^\pm := d\Gamma(P)|_{\mathcal{F}^\pm(h)}$ einer Projektion $P : h \rightarrow h$ vom Rang 1

$$\text{spec}(P^-) = \{0, 1\} \quad \text{aber} \quad \text{spec}(P^+) = \mathbb{N}_0.$$

Die Interpretation dieser Aussage ist, dass sich unendlich viele Bosonen aber höchstens ein Fermion im gleichen Zustand befinden können. Letzteres nennt man das *Pauli-Prinzip*.

Die Zuordnung

$$(h, H) \longrightarrow (\mathcal{F}(h), d\Gamma(H))$$

nennt man auch *Zweitquantisierung*. Im Gegensatz zur Erstquantisierung (also der Zuordnung eines selbstadjungierten Operators H auf h zu einer die klassische Dynamik festlegenden Hamiltonfunktion) ist dies eine mathematisch definierte Operation³⁶.

15.2 Das ideale Gas

Wir wollen, ausgehend von einem Einteilchen-Hamiltonoperator H auf dem Hilbertraum h , die großkanonischen Ensembles untersuchen, wahlweise mit Boltzmann-, fermionischer bzw. bosonischer Statistik. Wir betrachten also den zweitquantisierten Operator

$$K_\mu := d\Gamma(H - \mu\mathbb{1}) = d\Gamma(H) - \mu N \quad (\mu \in \mathbb{R}).$$

und seine Restriktionen K_μ^\pm auf die bosonischen bzw. fermionischen Fock-Räume $\mathcal{F}^\pm(h)$. Der Parameter μ , das chemische Potential, soll dabei den Erwartungswert der Teilchenzahl steuern. Für inverse Temperatur $\beta \geq 0$ würden wir gern durch

$$\omega_{\beta,\mu} : \mathcal{A} \rightarrow \mathbb{C} \quad , \quad \omega_{\beta,\mu}(A) := \frac{\text{tr}_{\mathcal{F}(h)}(A \exp(-\beta K_\mu))}{\text{tr}_{\mathcal{F}(h)}(\exp(-\beta K_\mu))} \quad (15.4)$$

durch β und μ parametrisierte Zustände auf einer $\mathcal{F}(h)$ zugeordneten Observablenalgebra \mathcal{A} definieren. Dazu müssen wir verlangen, dass $\exp(-\beta K_\mu)$ ein Spurklasseoperator ist, denn sonst wäre die Zustandssumme unendlich.

Analog wird $\mathcal{F}^\pm(h)$ die *CAR-Algebra* \mathcal{A}^- (CAR für *kanonische Antikommutator-Relation*) bzw. die CCR-Algebra \mathcal{A}^+ zugeordnet, sowie restringierte Operatoren und ihre Zustände

$$K_\mu^\pm := K_\mu|_{\mathcal{F}^\pm(h)} \quad , \quad \omega_{\beta,\mu}^\pm : \mathcal{A}^\pm \rightarrow \mathbb{C} \quad , \quad \omega_{\beta,\mu}^\pm(A) := \frac{\text{tr}_{\mathcal{F}^\pm(h)}(A \exp(-\beta K_\mu^\pm))}{\text{tr}_{\mathcal{F}^\pm(h)}(\exp(-\beta K_\mu^\pm))} ,$$

³⁶Genauer ist sie ein Funktor auf der durch die Paare (Hilbertraum, selbstadjungierter Operator) als Objekte und die unitären Abbildungen als Morphismen gegebenen Kategorie.

siehe [BR], Vol. 2. Wir diskutieren hier nicht diese C^* -Algebren, sondern betrachten die Zustände nur auf gewissen zweitquantisierten Observablen A .

Wir beginnen mit den Gibbs-Zuständen $\omega_{\beta,\mu}$. Hier sind die Teilchen unterscheidbar. Wie wir gleich sehen werden, ist (15.4) höchstens dann definiert, wenn $\exp(-\beta H)$ ein Spurklasseoperator auf h ist. Dann existiert aber eine ONB $\{b_i\}_{i \in I}$ von Eigenvektoren $b_i \in h$ von H mit Eigenwerten $e_i \in \mathbb{R}$, $e_i \leq e_{i+1}$.

Wir wollen die mittlere Häufigkeit der Teilchen berechnen, die sich im durch den Eigenvektor v_i von H gegebenen Einteilchen-Zustand befindet. Diese ist gleich der *mittleren Besetzungszahl*

$$\langle P_i \rangle := \omega_{\beta,\mu}(P_i) \quad \text{für} \quad P_i := d\Gamma(\pi_i),$$

wenn $\pi_i \in B(h)$ die Projektion auf $\text{span}(b_i)$ bezeichnet.

Begrifflich von dieser Besetzungszahl zu unterscheiden ist der Erwartungswert der Anzahl der Teilchen mit Energie e_n , denn es können Degenerationen von Eigenwerten vorkommen.

15.4 Satz *Es sei H ein selbstadjungierter Operator auf dem Einteilchen-Hilbert-raum h und $\beta \geq 0$. Dann sind äquivalent:*

1. $\exp(-\beta H)$ ist ein Spurklasseoperator auf h , $\beta > 0$ und $\mu < F(\beta)$, mit der Freien Energie $F(\beta) := -\frac{1}{\beta} \log(\text{tr}_h(\exp(-\beta H)))$.
2. $\exp(-\beta K_\mu)$ ist ein Spurklasseoperator auf $\mathcal{F}(h)$.

Unter diesen Bedingungen ist der Erwartungswert der mittleren Besetzungszahl

$$\langle P_i \rangle = \frac{\exp(-\beta(e_i - \mu))}{1 - \sum_{j \in I} \exp(-\beta e'_j)} \quad (i \in I). \quad (15.5)$$

Bew.:

- Gilt 1., dann existiert eine ONB $\{b_j\}_{j \in I}$ von Eigenvektoren $b_j \in h$ von H mit Eigenwerten $e_j \in \mathbb{R}$, $e_j \leq e_{j+1}$. Mit der Abkürzung $e'_j := e_j - \mu$ ist

$$\text{tr}_{h^n}(\exp(-\beta K_\mu)) = \sum_{(i_1, \dots, i_n) \in I^n} \exp\left(-\beta \sum_{k=1}^n e'_{i_k}\right) = \left(\sum_{i \in I} \exp(-\beta e'_i)\right)^n.$$

Daraus folgt mit $\sum_{i \in I} \exp(-\beta e'_i) = \exp(\beta\mu) \text{tr}_h(\exp(-\beta H)) < 1$ die Formel der geometrischen Reihe:

$$\begin{aligned} \text{tr}_{\mathcal{F}(h)}(\exp(-\beta K_\mu)) &= \sum_{n \in \mathbb{N}_0} \text{tr}_{h^n}(\exp(-\beta K_\mu)) \\ &= \frac{1}{1 - \sum_{i \in I} \exp(-\beta e'_i)} \end{aligned} \quad (15.6)$$

- Gilt Aussage 2., dann zeigt die Form (15.6) von $\text{tr}_{\mathcal{F}(h)}(\exp(-\beta K_\mu))$, dass β nicht Null sein kann und $\mu < F(\beta)$ gelten muss. Dann folgt 1. mit (15.3): $\text{tr}_h(\exp(-\beta H)) = e^{-\mu\beta} \text{tr}_h(\exp(-\beta K_\mu|_h))$.
- Mit der Formel (15.6) für den Nenner ergibt sich mit $x := \sum_{j \in I} \exp(-\beta e'_j)$

$$\langle P_i \rangle = \frac{\text{tr}_{\mathcal{F}(h)}(P_i \exp(-\beta K_\mu))}{\text{tr}_{\mathcal{F}(h)}(\exp(-\beta K_\mu))} = \frac{\exp(\beta e'_i)}{1 - x},$$

denn aus $\text{tr}_{h_0}(P_i \exp(-\beta K_\mu)) = 0$ und

$$\begin{aligned} \text{tr}_{h_n}(P_i \exp(-\beta K_\mu)) &= \sum_{k=1}^n \sum_{(j_1, \dots, j_n) \in I^n: j_k=i} \exp\left(-\beta \sum_{k=1}^n e'_{j_k}\right) \\ &= n \exp(-\beta e'_i) \text{tr}_{h_{n-1}}(\exp(-\beta K_\mu)) \end{aligned}$$

($n \in \mathbb{N}$) leiten wir die Formel

$$\begin{aligned} \text{tr}_{\mathcal{F}(h)}(P_i \exp(-\beta K_\mu)) &= \sum_{n \in \mathbb{N}_0} \text{tr}_{h_n}(P_i \exp(-\beta K_\mu)) \\ &= \exp(-\beta e'_i) \sum_{n \in \mathbb{N}_0} n x^{n-1} \\ &= \exp(-\beta e'_i) \frac{d}{dx} \sum_{n \in \mathbb{N}_0} x^n = \frac{\exp(-\beta e'_i)}{(1-x)^2} \end{aligned}$$

für den Zähler ab. □

15.5 Bemerkung Der Erwartungswert (15.5) lässt sich in der Form

$$\langle P_i \rangle = \frac{\exp(-\beta e_i)}{\exp(-\beta \mu) - \sum_{j \in I} \exp(-\beta e_j)} \quad (i \in I) \quad (15.7)$$

schreiben.

Der Nenner in (15.5) ist unabhängig von i und nimmt bei Variation von $\mu \in (-\infty, F(\beta))$ beliebige positive Werte an. Wir können also den Erwartungswert der Teilchenzahl

$$\langle N \rangle := \omega_{\beta, \mu}(N) = \sum_{i \in I} \langle P_i \rangle$$

jeden vorgegebenen positiven Wert annehmen lassen, ohne die Anteile

$$\frac{\langle P_i \rangle}{\langle N \rangle} = \frac{\exp(-\beta e_i)}{\sum_{j \in I} \exp(-\beta e_j)} \quad (i \in I)$$

der Besetzungszahlen zu verändern. Dies unterscheidet die Boltzmann-Statistik von den zu besprechenden Statistiken.

15.3 Das ideale Fermigas

Für die fermionischen Zustände $\omega_{\beta,\mu}^-$ wollen wir wieder die mittlere Häufigkeit der Teilchen berechnen, die sich im durch den Eigenvektor v_i von H gegebenen Einteilchen-Zustand befindet. Diese ist gleich der *mittleren Besetzungszahl*

$$\langle P_i^- \rangle := \omega_{\beta,\mu}(P_i^-) \quad \text{für} \quad P_i^- := d\Gamma(\pi_i)|_{\mathcal{F}^-(h)} \quad (i \in I),$$

wenn $\pi_i \in B(h)$ die Projektion auf $\text{span}(b_i)$ bezeichnet.

15.6 Satz *Es sei H ein selbstadjungierter Operator auf dem Einteilchen-Hilbertraum h und $\beta \geq 0$. Dann sind äquivalent:*

1. $\exp(-\beta H)$ ist ein Spurklasseoperator auf h .
2. Für alle $\mu \in \mathbb{R}$ ist $\exp(-\beta K_\mu^-)$ ein Spurklasseoperator auf $\mathcal{F}^-(h)$.

Unter diesen Bedingungen ist der Erwartungswert der mittleren Besetzungszahl

$$\langle P_i \rangle = \frac{1}{\exp(\beta(e_i - \mu)) + 1} \in (0, 1) \quad (i \in I).$$

Bew.: (Vergleiche auch mit [BR], Kap. 5.2.4)

- Gilt 1., dann gibt es für die Indexmenge $I := \{1, \dots, \dim(h)\}$ bzw. $I := \mathbb{N}$, falls $\dim(h) = \infty$ eine ONB $\{b_n\}_{n \in I}$ von Eigenvektoren $b_n \in h$ von H mit Eigenwerten $e_n \in \mathbb{R}$, $e_n \leq e_{n+1}$, und

$$\text{tr}_{\mathcal{F}^-(h)}(\exp(-\beta K_\mu^-)) = \sum_{n \in \mathbb{N}_0} \text{tr}_{h_n^-}(\exp(-\beta K_\mu^-)).$$

Nun ist mit der Abkürzung $e'_j := e_j - \mu$

$$\text{tr}_{h_n^-}(\exp(-\beta K_\mu^-)) = \sum_{J \subseteq I, |J|=n} \exp\left(-\beta \sum_{j \in J} e'_j\right) = \sum_{J \subseteq I, |J|=n} \prod_{j \in J} \exp(-\beta e'_j),$$

also

$$\begin{aligned} \text{tr}_{\mathcal{F}^-(h)}(\exp(-\beta K_\mu^-)) &= \prod_{j \in I} (1 + \exp(-\beta e'_j)) & (15.8) \\ &\leq \prod_{j \in I} \exp(e^{-\beta e'_j}) = \exp\left(e^{\beta \mu} \sum_{j \in I} e^{-\beta e_j}\right) \\ &= \exp(e^{\beta \mu} \text{tr}(\exp(-\beta H))) < \infty. \end{aligned}$$

- Gilt umgekehrt Aussage 2., dann ist für $\mu = 0$

$$\text{tr}_h(\exp(-\beta H)) = \text{tr}_{\mathcal{F}^-(h)}(\Pi_1 \exp(-\beta K_0^-)) \leq \text{tr}_{\mathcal{F}^-(h)}(\exp(-\beta K_0^-)) < \infty,$$
wenn man unter Π_1 die Projektion auf den Einteilchen-Unterraum h von $\mathcal{F}^-(h)$ bezeichnet.
- Nach Aufgabe 15.3 ist $\text{spec}(P_i^-) = \{0, 1\}$, die selbstadjungierten Operatoren P_i^- sind also Projektionen. Daher muß für die fermionischen Besetzungszahlen $0 \leq \langle P_i^- \rangle \leq 1$ ($n \in I$) gelten. Mit (15.8) ergibt sich konkret

$$\begin{aligned} \langle P_i^- \rangle &= \frac{\text{tr}_{\mathcal{F}^-(h)}(P_i^- \exp(-\beta K_\mu^-))}{\text{tr}_{\mathcal{F}^-(h)}(\exp(-\beta K_\mu^-))} = \frac{\exp(-\beta e'_i) \prod_{j \neq i} (1 + \exp(-\beta e'_j))}{\prod_{j \in I} (1 + \exp(-\beta e'_j))} \\ &= \frac{1}{\exp(\beta(e_i - \mu)) + 1}. \end{aligned}$$

□

Wir können also, falls $\exp(-\beta H)$ ein Spurklasseoperator ist, für beliebige $\mu \in \mathbb{R}$ die Gibbszustände $\omega_{\beta, \mu}^-$ definieren.

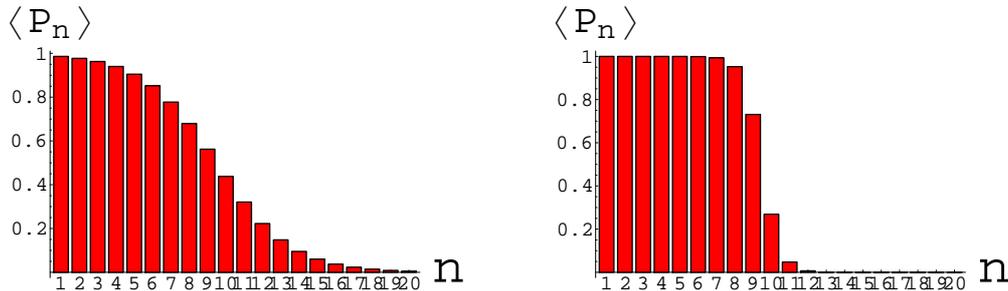


Abbildung 15.1: Besetzungszahlen der Fermi-Dirac-Verteilung für den 1D harmonischen Oszillator, mit Eigenwerten $e_n = n - \frac{1}{2}$ ($n \in \mathbb{N}$) und chemischem Potential $\mu = 10$.

Inverse Temperaturen: Links: $\beta = \frac{1}{2}$, rechts: $\beta = 2$

15.7 Beispiel Betrachten wir den eindimensionalen harmonischen Oszillator, d.h. $h = L^2(\mathbb{R})$, $H = \frac{1}{2} \left(-\frac{d^2}{dq^2} + q^2 \right)$, siehe Kapitel 3.3. Gemäß (3.1) ist

$$\text{spec}(H) = \left\{ n - \frac{1}{2} \mid n \in \mathbb{N} \right\}.$$

Also ist, siehe Abb. 15.1

$$\langle P_n^- \rangle = \frac{1}{\exp\left(\beta \left(n - \frac{1}{2} - \mu\right)\right) + 1}.$$

Für niedrige Temperaturen, d.h. im Limes $\beta \rightarrow \infty$ gilt für $\mu \notin \text{spec}(H)$

$$\langle P_i^- \rangle \sim \begin{cases} 1 & , e_i < \mu \\ 0 & , e_i > \mu \end{cases}$$

μ heißt daher *Fermikante*³⁷. In diesem Limes nennt man das ideale Fermigas entartet, da hier quantenmechanische Effekte besonders stark zur Geltung kommen.

15.8 Bemerkung Dass man für wechselwirkende Fermionen unter Umständen immer noch von einer Fermikante sprechen kann, wurde in einer Folge von zehn Artikeln kürzlich von FELDMANN, KNÖRRER und TRUBOWITZ bewiesen. In Teil I von [FKT] findet man eine Übersicht.

15.4 Das ideale Bosegas

Im Fall des idealen Fermigases gab es für das chemische Potential μ keine Restriktionen (Satz 15.6). Im Fall des Bosegases ist dies anders:

Wir schauen uns wieder die mittleren Besetzungszahlen

$$\langle P_i^+ \rangle := \omega_{\beta, \mu}(P_i^+) \quad \text{für} \quad P_i^+ := d\Gamma(\pi_i)|_{\mathcal{F}^+(h)} \quad (i \in I)$$

an, wobei $\pi_i \in B(h)$ die Projektion auf $\text{span}(b_i)$ bezeichnet.

15.9 Satz *Es sei H ein selbstadjungierter Operator auf dem Einteilchen-Hilbertraum h und $\beta \geq 0$. Dann sind äquivalent:*

1. $\exp(-\beta H)$ ist ein Spurklasseoperator, $\beta > 0$ und $\mu < \inf \text{spec}(H)$.
2. $\exp(-\beta K_\mu^+)$ ist ein Spurklasseoperator auf $\mathcal{F}^+(h)$.

Unter diesen Bedingungen ist der Erwartungswert der mittleren Besetzungszahl

$$\langle P_i^+ \rangle = \frac{1}{\exp(\beta(e_i - \mu)) - 1} \quad (i \in I).$$

Bew.:

- Gilt 1., dann existiert eine ONB $\{b_j\}_{j \in I}$ von Eigenvektoren $b_j \in h$ von H mit Eigenwerten $e_j \in \mathbb{R}$, $e_j \leq e_{j+1}$. Mit den Multiplizitäten m_j und der Abkürzung $e'_j := e_j - \mu$ ist

$$\text{tr}_{h_n^+}(\exp(-\beta K_\mu^+)) = \sum_{m: I \rightarrow \mathbb{N}_0: \|m\|_1 = n} \exp\left(-\beta \sum_{j \in I} m_j e'_j\right).$$

³⁷Man spricht auch von der *Fermienergie*. Genauer ist in physikalischen Situationen μ eine Funktion von β . In diesem Sinn ist $\lim_{T \rightarrow 0} \mu(1/T)$ die Fermienergie.

Daraus folgt mit $e'_j > 0$ die Abschätzung

$$\begin{aligned}
\mathrm{tr}_{\mathcal{F}^+(h)}(\exp(-\beta K_\mu^+)) &= \sum_{n \in \mathbb{N}_0} \mathrm{tr}_{h_n^+}(\exp(-\beta K_\mu^+)) \\
&= \sum_{m: I \rightarrow \mathbb{N}_0} \exp\left(-\beta \sum_{j \in I} m_j e'_j\right) = \sum_{m: I \rightarrow \mathbb{N}_0} \prod_{j \in I} \exp(-\beta m_j e'_j) \quad (15.9) \\
&= \prod_{j \in I} \frac{1}{1 - \exp(-\beta e'_j)} = \prod_{j \in I} \left(1 + \frac{\exp(-\beta e'_j)}{1 - \exp(-\beta e'_j)}\right) \\
&\leq \prod_{j \in I} \exp\left(\frac{\exp(-\beta e'_j)}{1 - \exp(-\beta e'_j)}\right) \leq \prod_{j \in I} \exp\left(\frac{\exp(-\beta e'_j)}{1 - \exp(-\beta e'_0)}\right) \\
&= \exp\left(\frac{\mathrm{tr}_h \exp(-\beta(H - \mu \mathbb{1}))}{1 - \exp(-\beta e'_0)}\right) = \exp\left(\frac{e^{\mu\beta} \mathrm{tr}_h \exp(-\beta H)}{1 - \exp(-\beta e'_0)}\right) < \infty.
\end{aligned}$$

- Die Form (15.9) von $\mathrm{tr}_{\mathcal{F}^+(h)}(\exp(-\beta K_\mu^+))$ zeigt, dass β nicht Null sein kann und $e'_j > 0$ gelten muss, also $\beta > 0$ und $\mu \leq \inf \mathrm{spec}(H)$. Dann folgt 1. mit $\mathrm{tr}(\exp(-\beta H)) = e^{-\mu\beta} \mathrm{tr}_h(\exp(-\beta K_\mu^-))$.
- Mit (15.9) ergibt sich konkret

$$\begin{aligned}
\langle P_i^+ \rangle &= \frac{\mathrm{tr}_{\mathcal{F}^+(h)}(P_i^+ \exp(-\beta K_\mu^+))}{\mathrm{tr}_{\mathcal{F}^+(h)}(\exp(-\beta K_\mu^+))} \\
&= \frac{\exp(-\beta e'_i)}{(1 - \exp(-\beta e'_i))^2} \frac{\prod_{j \in I} (1 - \exp(-\beta e'_j))}{\prod_{j \neq i} (1 - \exp(-\beta e'_j))} = \frac{1}{\exp(\beta e'_i) - 1}.
\end{aligned}$$

□

Gegenüber der Boltzmannverteilung sind also die energiearmen Niveaus stärker besetzt, siehe Abb. 15.2.

Wächst aber die Dichte der Eigenwerte e_j stark mit j , dann kann die Verteilung der Besetzungszahlen neben dem Energieminimum eine weitere Maximalstelle bei höheren Energien aufweisen. Dies ist typischerweise in drei Raumdimensionen der Fall. Dass bei positiven Temperaturen ein solches Maximum bei höheren Energien auftritt, ist aus der Boltzmann-Statistik bekannt.

Das ungewohnte physikalische Phänomen der Besetzung des Ein-Teilchen-Grundzustandes bei positiven Temperaturen wird *Bose-Einstein-Kondensation* genannt.

15.10 Beispiel Betrachten wir den dreidimensionalen harmonischen Oszillator, d.h. $H := \frac{1}{2}(-\Delta + \|q\|^2)$ auf dem Hilbertraum $h := L^2(\mathbb{R}^3)$. Gemäß (3.1) ist

$$\mathrm{spec}(H) = \left\{n + \frac{1}{2} \mid n \in \mathbb{N}\right\} \quad \text{mit Multiplizität} \quad g_n := \binom{n+1}{2}.$$

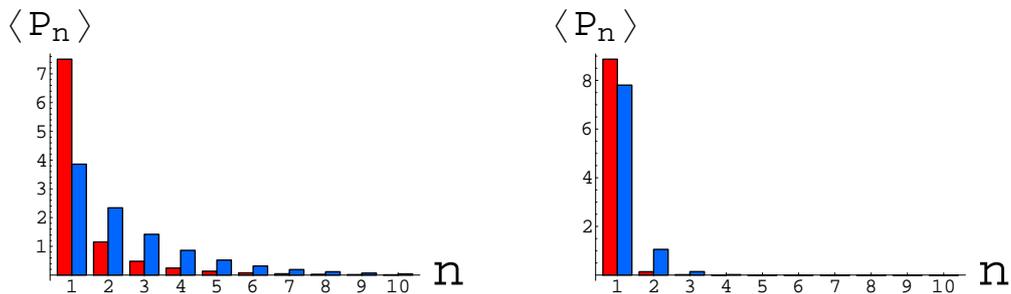


Abbildung 15.2: Besetzungszahlen der Bose-Einstein-Verteilung (linke Balken) und Boltzmann-Verteilung (rechte Balken) für den 1D harmonischen Oszillator, mit Eigenwerten $e_n = n - \frac{1}{2}$ ($n \in \mathbb{N}$). Inverse Temperaturen: Links: $\beta = \frac{1}{2}$, rechts: $\beta = 2$. Die chemischen Potentiale wurden so gewählt, dass für die drei Ensembles die Gesamtzahl $\langle N \rangle$ der Teilchen gleich ist.

Also ist die Besetzungszahl des Energieniveaus $n + \frac{1}{2}$ gleich

$$\frac{1}{2} \frac{n(n+1)}{\exp\left(\beta\left(n - \frac{1}{2} - \mu\right)\right) - 1},$$

siehe Abb. 15.3.

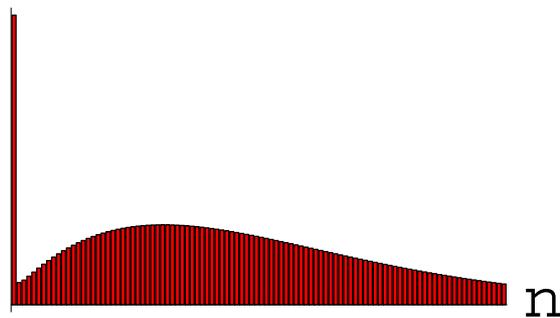


Abbildung 15.3: Bose-Einstein-Kondensation für den 3D harmonischen Oszillator.

15.11 Bemerkungen 1. Das bei Temperaturen unterhalb 2.17 Kelvin auftretende suprafluide Helium-4 ist ein Beispiel für ein Bose-Einstein-Kondensat. Der mit vielen Atomen besetzte Grundzustand verhält sich wie ein makroskopisches Quanten-Teilchen.

2. In [BR], Vol. 2. wird die Bose-Einstein-Kondensation des dreidimensionalen idealen Elektronengases im thermodynamischen Limes unendlicher Containergröße berechnet.

Im Buch [LSSY] von LIEB, SEIRINGER, SOLOVEJ und YNGVASON wird die Bose-Einstein-Kondensation für wechselwirkende Bosonen untersucht.

Anhänge

A Topologie und Metrik

A.1 Definition Ein **topologischer Raum** ist ein Paar (M, \mathcal{O}) , bestehend aus einer Menge M und einer Menge \mathcal{O} von Teilmengen (genannt **offene Mengen**) von M derart, dass gilt

1. \emptyset und M sind offen.
2. beliebige Vereinigungen offener Mengen sind offen
3. der Durchschnitt von je zwei offenen Mengen ist offen

\mathcal{O} heisst **Topologie** von M .

Sind \mathcal{O}_1 und \mathcal{O}_2 Topologien auf M und $\mathcal{O}_1 \subseteq \mathcal{O}_2$, dann heisst \mathcal{O}_1 **gröber** als \mathcal{O}_2 und \mathcal{O}_2 **feiner** als \mathcal{O}_1 .

A.2 Beispiel 1. Die **diskrete Topologie** 2^M (Potenzmenge) bzw. die **triviale Topologie** $\{M, \emptyset\}$ sind die feinste bzw. gröbste Topologie einer Menge M .

2. Ist $N \subseteq M$ Teilmenge eines topologischen Raumes (M, \mathcal{O}) , dann ist $\mathcal{O}_N := \{U \cap N \mid U \in \mathcal{O}\}$ eine Topologie auf N , die so genannte **Teilraumtopologie** oder **induzierte Topologie**.

A.3 Satz Es sei \mathcal{F} eine beliebige Familie von Teilmengen einer Menge M . Dann existiert eine eindeutige gröbste Topologie $\mathcal{O}(\mathcal{F})$ von M mit $\mathcal{F} \subseteq \mathcal{O}(\mathcal{F})$.

$\mathcal{O}(\mathcal{F})$ heisst die von \mathcal{F} **erzeugte Topologie**.

In vielen Fällen wird die Topologie von einer Metrik erzeugt.

A.4 Definition • Ein **metrischer Raum** ist ein Paar (M, d) , bestehend aus einer Menge M und einer Funktion $d : M \times M \rightarrow [0, \infty)$, derart, dass für alle $x, y, z \in M$ gilt

1. $d(x, y) = 0 \iff x = y$ (Positivität)
2. $d(x, y) = d(y, x)$ (Symmetrie)
3. $d(x, z) \leq d(x, y) + d(y, z)$ (Dreiecksungleichung)

- d heisst **Metrik**, $d(x, y)$ **Abstand von x und y** .
- Für $x \in M$ und $\varepsilon > 0$ heisst

$$U_\varepsilon(x) := \{y \in M \mid d(y, x) < \varepsilon\}$$

(offene) ε -**Umgebung von x in M** .

A.5 Definition Für einen metrischen Raum (M, d) heißt

$$\mathcal{O}(d) := \{V \subseteq M \mid \forall x \in V \exists \varepsilon > 0 : U_\varepsilon(x) \subseteq V\}. \quad (\text{A.1})$$

die (metrische) **Topologie von** (M, d) .

A.6 Satz $(M, \mathcal{O}(d))$ ist ein topologischer Raum, und die $U_\varepsilon(x)$ sind offen.

Oft erzeugen verschiedene Metriken die gleiche Topologie. Insbesondere gilt dies für Metriken auf Vektorräumen, die von äquivalenten Normen abstammen.

Wir erweitern unseren topologischen Sprachschatz, indem wir die uns vom Raum \mathbb{R} bekannten Begriffsbildungen verallgemeinern:

A.7 Definition • $A \subseteq M$ heißt **abgeschlossen**, wenn $M \setminus A \in \mathcal{O}$.

- $U \subseteq M$ heißt **Umgebung** von $x \in M$, wenn es eine offene Menge V mit $x \in V \subseteq U$ gibt.
- Für $A \subseteq M$ und $x \in M$ heißt x **innerer** bzw. **äußerer** bzw. **Randpunkt von** A , je nachdem, ob A oder $M \setminus A$ oder keines von beiden Umgebung von x ist.
 - $\overset{\circ}{A} := \{x \in M \mid x \text{ ist innerer Punkt von } A\}$ heißt das **Innere von** A .
 - $\overline{A} := \{x \in M \mid x \text{ nicht äußerer Punkt von } A\}$ heißt **abgeschlossene Hülle von** A .
 - $\partial A := \{x \in M \mid x \text{ Randpunkt von } A\}$ heißt **Rand von** A .
- $x \in M$ heißt **Häufungspunkt** der Teilmenge $A \subseteq M$, wenn für keine Umgebung U von x die Menge $U \cap (A \setminus \{x\})$ leer ist.

A.8 Beispiel Für $A := (0, 1] \subseteq \mathbb{R}$ ist $\overset{\circ}{A} = (0, 1)$, $\overline{A} = [0, 1]$ und $\partial A = \{0, 1\}$.

Nun ist durch $d(x, y) := \|x - y\|$ eine Metrik auf einem normierten Vektorraum $(V, \|\cdot\|)$ gegeben, also auch eine Topologie $\mathcal{O}(d)$.

Äquivalente Normen auf einem Vektorraum erzeugen die gleiche Topologie, denn in diesem Fall findet man zu jeder ε -Kugel um x bezüglich der einen Norm eine ganz in dieser enthaltene ε' -Kugel um x bezüglich der anderen Norm.

Daher gibt es auf endlich-dimensionalen Vektorräumen nur eine Topologie, die von einer Norm erzeugt wurde. In unendlich-dimensionalen Vektorräumen gilt dies aber nicht mehr.

A.9 Definition Es sei (M, \mathcal{O}) ein topologischer Raum.

- Eine Familie $(U_i)_{i \in I}$ von $U_i \in \mathcal{O}$ heisst **offene Überdeckung** von M , wenn $\bigcup_{i \in I} U_i = M$ gilt.
- (M, \mathcal{O}) heisst **kompakt**, wenn jede offene Überdeckung eine **endliche Teilüberdeckung**, d.h. offene Überdeckung $(U_j)_{j \in J}$ mit $J \subseteq I$ endlich, besitzt.
- (M, \mathcal{O}) heisst **lokalkompakt**, wenn alle $m \in M$ eine kompakte Umgebung besitzen.

A.10 Definition Es sei (M, \mathcal{O}) ein topologischer Raum.

- $A \subseteq M$ heisst **abgeschlossen**, wenn $M \setminus A \in \mathcal{O}$.
- $A \subseteq M$ heisst **Umgebung von** $x \in M$, wenn eine offene Menge $U \in \mathcal{O}$ mit $x \in U \subseteq A$ existiert.
- $x \in M$ heisst **innerer Punkt** bzw. **äußerer Punkt** bzw. **Randpunkt** von $A \subseteq M$, wenn A bzw. $M \setminus A$ bzw. keine dieser Mengen Umgebung von x ist.
- Die Menge $\bar{A} := \{x \in M \mid x \text{ ist nicht äußerer Punkt von } A\}$ heisst der **Abschluss** von A .
- (M, \mathcal{O}) heisst **Hausdorffraum**, wenn für alle $x \neq y \in M$ disjunkte Umgebungen U_x von x und U_y von y existieren.

Da in einem metrischen Raum (M, d) alle Punkte $x \neq y \in M$ positiven Abstand besitzen, ist der topologische Raum $(M, \mathcal{O}(d))$ hausdorffsch.

A.11 Definition Eine Folge $(x_n)_{n \in \mathbb{N}}$ in einem metrischen Raum (M, d) heisst **Cauchyfolge**, wenn für alle $\varepsilon > 0$ eine Schranke $n_0 \equiv n_0(\varepsilon)$ existiert, sodass

$$d(x_m, x_n) < \varepsilon \quad (m, n \geq n_0).$$

(M, d) heisst **vollständig**, wenn jede Cauchyfolge konvergiert.

A.12 Satz Jeder kompakte metrische Raum ist vollständig.

B Fouriertransformation auf abelschen Gruppen

- Im Kapitel 5 (klassische Spinsysteme) wurde die Fouriertransformation auf der abelschen Gruppe E^Λ (mit $E = \mathbb{Z}/2\mathbb{Z}$ und $\Lambda \subseteq \mathbb{Z}^d$) benutzt, um die Energiefunktion $H_\Lambda : E^\Lambda \rightarrow \mathbb{R}$ auf dem Gebiet Λ mithilfe des Wechselwirkungspotentials J auszudrücken.
- In Kapitel 8.2 (Korrelationsungleichungen) wurde der durch die Fouriertransformation gegebene Zusammenhang zwischen der Multiplikation von Funktionen und der Faltung ihrer Fouriertransformierten zur Ableitung der so genannten GKS-Ungleichungen verwandt.
- Bei der in Kapitel 10 erfolgten Ableitung der Freien Energie des Isingmodells benutzen wir "periodische Randbedingungen", d. h. den Konfigurationsraum E^{V_L} bez. der abelschen Gruppe $V_L := (\mathbb{Z}/L\mathbb{Z})^2$, und die Fouriertransformation bezüglich dieser Gruppe.

Warum spricht man in diesen Situationen von Fouriertransformation? Dies, d. h. der allgemeine Begriff von Fouriertransformation, soll jetzt ohne Beweise kurz dargestellt werden. Eine detaillierte Darstellung findet man z. B. in RUDIN [Rud].

1. Die Fouriertransformation bildet Funktionen $f : G \rightarrow \mathbb{C}$ auf einer abelschen Gruppe G auf Funktionen $\hat{f} : G^* \rightarrow \mathbb{C}$ auf der zu G dualen Gruppe G^* ab. Genauer betrachtet man *topologische* abelsche Gruppen, die gleichzeitig ein topologischer Hausdorffraum sind, für den die Abbildung $G \times G \rightarrow G$, $(x, y) \mapsto x - y$ stetig ist. Zusätzlich verlangt man, dass G *lokalkompakt* ist, also jeder Punkt $x \in G$ eine kompakte Umgebung besitzt.

B.1 Beispiel (a) $(\mathbb{R}, +)$ mit der üblichen, durch die offenen Intervalle erzeugten Topologie.

(b) $(\mathbb{Z}, +)$ mit der diskreten Topologie, in der alle $\Lambda \subseteq \mathbb{Z}$ offen sind.

(c) (S^1, \cdot) mit $S^1 := \{c \in \mathbb{C} \mid |c| = 1\}$. Mittels der Exponentialabbildung $(\mathbb{R}, +) \mapsto (S^1, \cdot)$, $x \mapsto \exp(2\pi i x)$, können wir die Gruppenverknüpfung additiv schreiben, und \mathbb{R}/\mathbb{Z} wird isomorph zu S^1 .

(d) $(\mathbb{Z}/n\mathbb{Z}, +)$ mit diskreter Topologie.

Die Lokalkompaktheit bleibt bei endlichen Produkten $\times_{i=1}^n G_i$ erhalten, die Kompaktheit nach dem Satz von Tychonov sogar bei beliebigen Produkten. Somit können wir analog die Gruppen $(\mathbb{R}^k, +)$, $(\mathbb{Z}^k, +)$, $(\mathbb{T}^k, +)$ mit $\mathbb{T}^k := (\mathbb{R}/\mathbb{Z})^k$, $(\mathbb{Z}/n\mathbb{Z})^k$ etc. betrachten.

2. Die Lokalkompaktheit der abelschen Gruppe G ermöglicht es, geeignete Funktionen $f : G \rightarrow \mathbb{C}$ zu integrieren, wobei das Integral von f und der um y verschobenen Funktion $L_y f : G \rightarrow \mathbb{C}$, $(L_y f)(x) := f(x + y)$ für alle $y \in G$ gleich ist.

Es existiert nämlich auf der Sigma-Algebra \mathcal{F} der Borelmengen $B \subseteq G$ ein translationsinvariantes Maß

$$m : \mathcal{F} \rightarrow [0, \infty) \cup \{\infty\}$$

mit $m(B) > 0$ für $B \neq \emptyset$ offen. Dieses so genannte *Haarsche Maß* m ist bis auf eine positive multiplikative Konstante eindeutig. Ist G kompakt, dann wählt man oft das Haarsche Wahrscheinlichkeitsmaß, mit $\int_G dm = 1$.

B.2 Beispiel (a) Das Lebesguemaß auf $(\mathbb{R}, +)$.

(b) Das zählende Maß m auf $(\mathbb{Z}, +)$, mit $m(\Lambda) := |\Lambda|$.

(c) Das auf $(\mathbb{R}/\mathbb{Z}, +)$ vom Lebesguemaß induzierte Maß m (mit $m([a, b]) = b - a$ für Intervalle $[a, b] \subseteq [0, 1]$).

(d) Das durch $m(\Lambda) := |\Lambda|/n$ definierte Wahrscheinlichkeitsmaß m auf $(\mathbb{Z}/n\mathbb{Z}, +)$.

3. Für $1 \leq p \leq \infty$ betrachten wir den Vektorraum der Borelfunktionen

$$f : G \rightarrow \mathbb{C} \quad \text{mit} \quad \|f\|_p := \left(\int_G |f|^p dm \right)^{1/p} < \infty.$$

Nach Identifikation von Funktionen, die nur auf einer Menge E vom Maß $m(E) = 0$ differieren, erhalten wir den Banachraum $L^p(G)$ mit Norm $\|\cdot\|_p$.

- Für $f \in L^1(G)$ und $g \in L^\infty(G)$ ist die *Faltung* $f * g : G \rightarrow \mathbb{C}$ von f und g

$$(f * g)(x) := \int_G f(x - y)g(y) dm(y)$$

eine L^∞ -Funktion.

- Ist auch $g \in L^1(G)$, dann existiert $f * g(x)$ für m -fast alle $x \in G$, und es ist

$$\|f * g\|_1 \leq \|f\|_1 \cdot \|g\|_1.$$

- Sind $f, g, h \in L^1(G)$, dann ist

$$f * g = g * f \quad \text{und} \quad (f * g) * h = f * (g * h),$$

d. h. die Faltung $* : L^1(G) \times L^1(G) \rightarrow L^1(G)$ ist kommutativ und assoziativ.

4. Eine Funktion $\chi : G \rightarrow S^1$ heißt *Charakter* von G , wenn χ ein Gruppenhomomorphismus ist, d. h.

$$\chi(x + y) = \chi(x) \cdot \chi(y) \quad (x, y \in G)$$

gilt. Die Menge G^* der stetigen Charaktere von G bildet bezüglich der Verknüpfung

$$(\chi + \chi')(x) := \chi(x) \cdot \chi'(x) \quad (\chi, \chi' \in G^*, x \in G)$$

eine abelsche Gruppe $(G^*, +)$, die *duale Gruppe* von $(G, +)$. Ist G eine lokalkompakte abelsche Gruppe, so auch G^* ³⁸, und es gilt $G^{**} = G$.

B.3 Beispiel (a) $(\mathbb{R}^n, +)^* \cong (\mathbb{R}^n, +)$, Charaktere $x \mapsto e^{ik \cdot x}$, $k \in (\mathbb{R}^n)^*$

(b) $(\mathbb{Z}, +)^* \cong (\mathbb{R}/\mathbb{Z}, +)$, Charaktere $x \mapsto e^{2\pi i k x}$, $k \in [0, 1)$

(c) $(\mathbb{Z}/n\mathbb{Z})^* \cong (\mathbb{Z}/n\mathbb{Z})$, Charaktere $x \mapsto e^{2\pi i k x/n}$, $k \in \{0, \dots, n-1\}$.

Statt der Charaktere χ_k benutzt man in diesen Fällen den Parameter k zur Kennzeichnung der Elemente der dualen Gruppe.

5. Die *Fouriertransformierte* einer Funktion $f \in L^1(G)$ ist durch

$$\hat{f} \in L^\infty(G^*) \quad , \quad \hat{f}(k) := \int_G f(x) \chi_k(-x) dm(x)$$

definiert. Es gilt:

$$\|\hat{f}\|_\infty \leq \|f\|_1 \quad \text{und} \quad \widehat{\hat{f} \cdot \hat{g}} = \widehat{\widehat{f} * \widehat{g}}.$$

Da der Unterraum $\{f \in L^2(G) \mid f \in L^1(G)\}$ dicht ist, kann die Fouriertransformation eindeutig auf den Hilbertraum $L^2(G)$ der quadratintegriblen Funktionen fortgesetzt werden, und es gilt (für eine geeignete Normierung von m^*) die *Parseval-Formel*

$$\int_G f(x) \overline{g(x)} dm(x) = \int_{G^*} \hat{f}(k) \overline{\hat{g}(k)} dm^*(k) \quad (f, g \in L^2(G)).$$

³⁸In der so genannten *kompakt-offenen* Topologie, das ist die größte Topologie auf G^* , bezüglich derer die Paarung $G^* \times G \rightarrow S^1$, $(\chi, x) \mapsto \chi(x)$ stetig ist.

C Ordnung der Zustände

Wir haben schon eine Methode kennen gelernt, verschiedene Zustände nach dem Grad ihrer Ordnung zu vergleichen. Ein Zustand ist danach umso geordneter, je kleiner seine Entropie ist. Natürlich ist eine einzige Zahl nur eine grobe Kenngröße, und genauere Vergleichskriterien wären wünschenswert. Wir wollen nun zwei Dichtematrizen ρ^I und ρ^{II} eines Hilbertraumes \mathcal{H} vergleichen. Wir müssen dazu nicht voraussetzen, dass \mathcal{H} endlichdimensional ist.

Zunächst sind zwar Dichtematrizen ρ positive Operatoren: $\rho \geq 0$, d. h.

$$\langle x, \rho x \rangle \geq 0 \quad (x \in \mathcal{H}).$$

Andererseits lassen sie sich bezüglich *dieser* natürlichen Ordnungsrelation hermitescher Operatoren nicht vergleichen. Denn aus $\rho^I \geq \rho^{II}$, also $\rho^I - \rho^{II} \geq 0$ folgt mit $\text{tr}(\rho^I - \rho^{II}) = \text{tr}(\rho^I) - \text{tr}(\rho^{II}) = 0$ schon $\rho^I = \rho^{II}$.

Seien $\lambda_i^I, \lambda_i^{II}$, $1 \leq i \leq \dim \mathcal{H}$ die *Eigenwerte* von ρ^I bzw. ρ^{II} . Wir ordnen sie nach absteigender Größe, sodass $\lambda_i^k \leq \lambda_j^k$ für $i \geq j$.

Mit diesen Eigenwerten betrachten wir deren Partialsummen

$$\mu_l^k := \sum_{j=1}^l \lambda_j^k.$$

Es gilt also insbesondere

$$\lambda_1^k \leq \mu_i^k \leq \mu_j^k \leq 1 \quad \text{für } i \leq j.$$

C.1 Definition ρ^I heißt **gemischter** als ρ^{II} ($\rho^I \triangleright \rho^{II}$), falls

$$\mu_l^I \leq \mu_l^{II} \quad (l \in \{1, \dots, \dim \mathcal{H}\}).$$

C.2 Beispiel 1. $\begin{pmatrix} \frac{1}{2} & 0 & 0 \\ 0 & \frac{1}{2} & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \trianglelefteq \begin{pmatrix} \frac{1}{3} & 0 & 0 \\ 0 & \frac{1}{3} & 0 \\ 0 & 0 & \frac{1}{3} \end{pmatrix}$

2. Nicht alle Dichtematrizen sind vergleichbar:

$$\begin{pmatrix} \frac{1}{2} & 0 & 0 \\ 0 & \frac{1}{2} & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \not\trianglelefteq \begin{pmatrix} \frac{3}{4} & 0 & 0 \\ 0 & \frac{1}{8} & 0 \\ 0 & 0 & \frac{1}{8} \end{pmatrix} \quad \text{und} \quad \begin{pmatrix} \frac{1}{2} & 0 & 0 \\ 0 & \frac{1}{2} & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \not\triangleright \begin{pmatrix} \frac{3}{4} & 0 & 0 \\ 0 & \frac{1}{8} & 0 \\ 0 & 0 & \frac{1}{8} \end{pmatrix}.$$

Diese Relation definiert eine *Präordnung* auf dem Raum der Zustände, denn sie ist

a) reflexiv: $\rho \succeq \rho$

b) transitiv: $\rho^I \succeq \rho^{II}, \rho^{II} \succeq \rho^{III} \implies \rho^I \succeq \rho^{III}$.

Sie ist aber nicht antisymmetrisch, d. h. es gilt **nicht**

$$(\rho^I \succeq \rho^{II} \quad \text{und} \quad \rho^{II} \succeq \rho^I) \implies \rho^I = \rho^{II}.$$

Es handelt sich damit auch nicht um eine Teilordnung.

Äquivalente Elemente ρ^I und ρ^{II} , also solche mit $\rho^I \succeq \rho^{II}$ und $\rho^{II} \succeq \rho^I$ haben gleiche Partialsummen $\mu_i^I = \mu_i^{II}$, und damit sind auch die Eigenwerte $\lambda_i^I = \lambda_i^{II}$.

Damit können wir für $\dim \mathcal{H} < \infty$ eine unitäre Abbildung $U \in B(\mathcal{H})$ (für $\dim \mathcal{H} = \infty$ immerhin noch eine isometrische Abbildung auf den orthogonalen Komplementen der Kerne der ρ^k) finden mit

$$\rho^{II} = U \rho^I U^*.$$

C.3 Beispiel Für

$\rho^I = \begin{pmatrix} \frac{2}{3} & 0 \\ 0 & \frac{1}{3} \end{pmatrix}$ und $\rho^{II} = \begin{pmatrix} \frac{1}{3} & 0 \\ 0 & \frac{2}{3} \end{pmatrix}$ ist $U := \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$ eine solche Matrix.

- Fassen wir die äquivalenten Zustände zu Klassen zusammen, so existiert eine durch $\mu_l \equiv 1$ charakterisierte Klasse am wenigsten gemischter = reinster Zustände, nämlich die extremalen Zustände.
- Für $\dim \mathcal{H} < \infty$ existiert genau ein gemischtster Zustand, der Spurzustand.
- Für $\dim \mathcal{H} = \infty$ kann so etwas nicht vorkommen. Denn sei ρ_G ein Zustand mit $\rho_G \succeq \rho \forall \rho$ und λ_i die Eigenwerte von ρ . Durch Einführen einer Basis von Eigenvektoren können wir ρ_G durch die unendliche Matrix

$$\rho_G = \begin{pmatrix} \lambda_1 & & & \\ & \lambda_2 & & \\ & & \ddots & \\ & & & \ddots \end{pmatrix}$$

darstellen. Wir definieren nun $\tilde{\rho}_G$ durch

$$\tilde{\rho}_G := \begin{pmatrix} \frac{\lambda_1}{2} & & & & \\ & \frac{\lambda_1}{2} & & & \\ & & \frac{\lambda_2}{2} & & \\ & & & \frac{\lambda_2}{2} & \\ & & & & \ddots \end{pmatrix}.$$

Offensichtlich gilt $\text{tr}(\tilde{\rho}_G) = \sum_{i=1}^{\infty} \lambda_i = 1$, $\tilde{\rho}_G$ ist aber echt gemischer als ρ_G .

Wir erinnern uns, dass wir für $H = \mathbb{C}^2$ die Zustände $\rho = \frac{1}{2}(\mathbb{1} + \vec{c} \cdot \vec{\sigma})$ als Punkte $\vec{c} \in B$ der Vollkugel ansehen konnten, wobei die extremalen bzw. reinsten Punkte auf der Oberfläche saßen, während der gemischteste Zustand $\rho = \frac{1}{2} \cdot \mathbb{1}$ die Mitte der Kugel bildete, siehe Abb. reffig:ordnung. Allgemein bildeten die Zustände eine konvexe Menge. Für $\rho^{III} \trianglelefteq \rho^I$ und $\rho^{III} \trianglelefteq \rho^{II}$ gilt auch

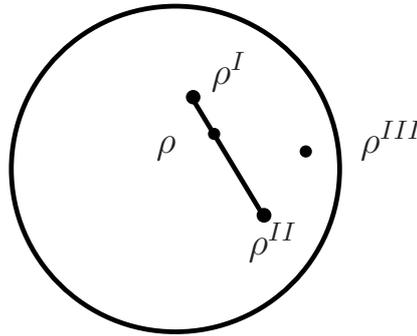


Abbildung C.1: Ordnung konvex-kombinierter Zustände

$$\rho^{III} \trianglelefteq \rho := \nu \rho^I + (1 - \nu) \rho^{II} \quad (0 \leq \nu \leq 1),$$

denn

$$\begin{aligned} \mu_l &= \sup_{\substack{\mu_l \subseteq H \\ \dim \mathcal{H}_l = l}} \text{tr}_{H_l}(\nu \rho^I + (1 - \nu) \rho^{II}) \\ &\leq \nu \sup_{H_l} \text{tr}_{H_l}(\rho^I) + (1 - \nu) \sup_{H_l} \text{tr}_{H_l}(\rho^{II}) = \nu \mu_l^I + (1 - \nu) \mu_l^{II} \leq \mu_l^{III}. \end{aligned}$$

Konvexkombinationen machen Dichtematrizen also gemischer.

In der Schrödingerdarstellung der Quantenmechanik ist die Zeitentwicklung durch die Abbildung $\rho \mapsto \rho_t := U(t)\rho U^*(t)$ mit $U(t) := e^{-iHt}$ gegeben. Unitäre Transformationen ändern die Eigenwerte nicht, führen also nicht aus den Äquivalenzklassen heraus. Insbesondere wird durch die Zeitentwicklung die Entropie eines Zustandes nicht verändert, denn die Entropie $S(\rho) = -\text{tr}(\rho \ln \rho)$ ist ja eine Funktion der Eigenwerte λ_i von ρ .

Das mag zunächst verwundern, denn der zweite Hauptsatz der Thermodynamik besagt ja nur, dass die Entropie mit der Zeit wächst. Andererseits ist die Frage, ob wir durch die Art und Weise unserer Messungen nicht statt ρ_t eventuell den starken Limes $s - \lim_{t \rightarrow \infty} \rho_t$ (falls existent) oder ein Zeitmittel $\frac{1}{T} \int_0^T dt \rho_t$

des Zustandes messen. In beiden Fällen wird aber die Entropie erhöht, denn Integration wird ja durch Konvexkombination und Limesbildung erreicht, was den Zustand chaotischer macht.

Die Bedeutung der durch \triangleright gegebenen Präordnung für die Thermodynamik wird durch folgenden Satz klar:

C.4 Satz $\rho^I \triangleright \rho^{II}$ genau dann, wenn für jede konvexe Funktion

$$k : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R} \quad \text{gilt:} \quad \text{tr}(k(\rho^I)) \leq \text{tr}(k(\rho^{II})) .$$

Bew.: Siehe THIRRING [Th], Kapitel 2.1. □

D Mean-Field-Theorie

Da man nur wenige statistisch-mechanische Modelle explizit berechnen kann, ist man auf Näherungslösungen angewiesen. Eine solche liefert die Mean-Field-Theorie. Sie basiert auf dem Ansatz, dass das gesuchte Gibbsmaß translationsinvariant ist, also insbesondere der Erwartungswert $\langle \sigma_i \rangle$ jedes Spins σ_i gleich ist. Es wird dann angenommen, dass jeder Spin nur mit dem Magnetfeld der anderen Spins σ_k wechselwirkt, das entsteht, wenn man die σ_k durch ihren Erwartungswert $s = \langle \sigma_k \rangle$ ersetzt. Als Selbstkonsistenzbedingung wird dann verlangt, dass auch $\langle \sigma_i \rangle = s$ ist.

D.1 Beispiel Isingmodell auf \mathbb{Z}^d . Wir ersetzen

$$H_\Lambda(\sigma) = -j \sum_{\langle \sigma_i \sigma_j \rangle} \sigma_i \sigma_j - h \sum_{i \in \Lambda} \sigma_i$$

durch

$$H_{\Lambda,s}(\sigma) := -(2dj s + h) \sum_{i \in \Lambda} \sigma_i .$$

Die Zustandssumme ist damit

$$Z_{\Lambda,s}(\beta) = (2 \cosh(\beta(2dj s + h)))^{|\Lambda|} ,$$

und der Erwartungswert des i -ten Spins

$$\langle \sigma_i \rangle_s(\beta) = \tanh(\beta(2dj s + h)) .$$

Die Selbstkonsistenzforderung ergibt damit

$$s \stackrel{!}{=} \langle \sigma_i \rangle_s(\beta) ,$$

also die *Mean Field-Gleichung*

$$s = \tanh(\beta(2dj s + h)). \quad (\text{D.1})$$

Betrachten wir zunächst den Spezialfall $h = 0$ eines verschwindenden äußeren Magnetfeldes, so ergeben sich für die linke und rechte Seite der Gleichung die in Abb. D.1 gezeigten Graphen.

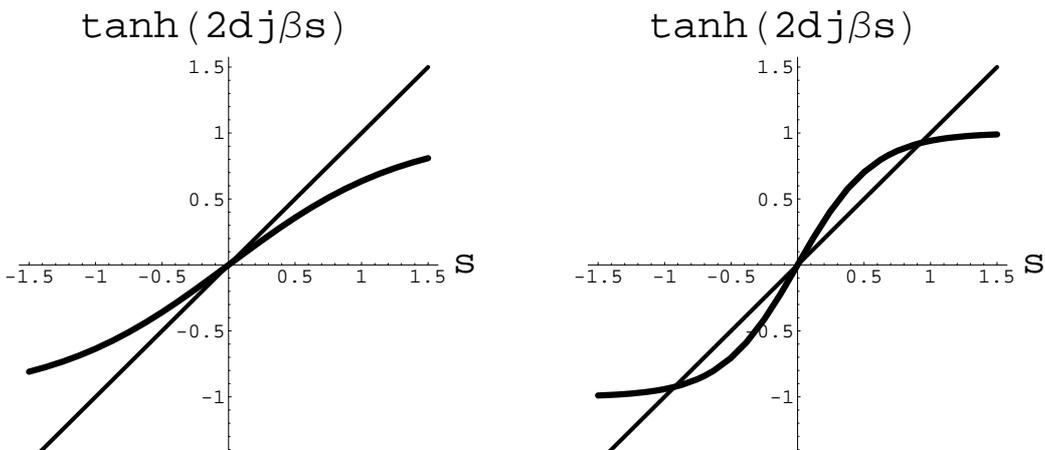


Abbildung D.1: Mean Field-Gleichung (D.1) für $h = 0$ und $\beta < \beta_{\text{cr}}^M$ (links) bzw. $\beta > \beta_{\text{cr}}^M$ (rechts)

Im Fall $\beta \leq \beta_{\text{cr}}^M := 1/(2dj)$ hat die Gleichung (D.1) also die einzige Lösung Null. Im Fall $\beta > \beta_{\text{cr}}^M$ gibt es zwei weitere Lösungen, die sich nur durch ihr Vorzeichen unterscheiden. Für kleine Werte von $\Delta\beta := \beta - \beta_{\text{cr}}^M > 0$ gewinnen wir diese durch Taylorentwicklung:

$$\tanh(2\beta dj s) = \tanh\left(\frac{\beta}{\beta_{\text{cr}}^M} s\right) = \frac{\beta}{\beta_{\text{cr}}^M} s - \frac{1}{3} \left(\frac{\beta}{\beta_{\text{cr}}^M}\right)^3 s^3 + \mathcal{O}\left(\left(\frac{\beta}{\beta_{\text{cr}}^M} s\right)^5\right).$$

Die drei Lösungen der Gleichung (D.1) sind also durch

$$\frac{\Delta\beta}{\beta_{\text{cr}}^M} s \approx \frac{s^3}{3}$$

gegeben. Die positive Lösung erfüllt dann $s \approx \sqrt{3\Delta\beta/\beta_{\text{cr}}^M}$.

Eine genauere Überlegung zeigt, dass die Lösung $s = 0$ für $\beta > \beta_{\text{cr}}^M$ eine größere Freie Energie als die beiden anderen Lösungen besitzt (mit $F = \langle H \rangle - TS$), sodass sie instabil wird.

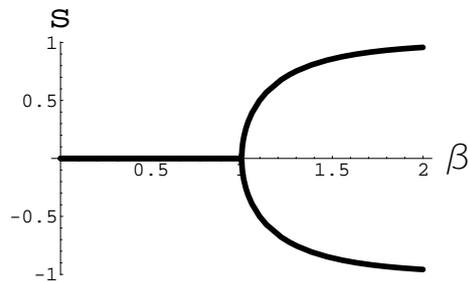


Abbildung D.2: Lösungen der Mean Field-Gleichung als Funktion der inversen Temperatur, für äusseres Magnetfeld $h = 0$ und $\beta_{\text{cr}}^M = 1$

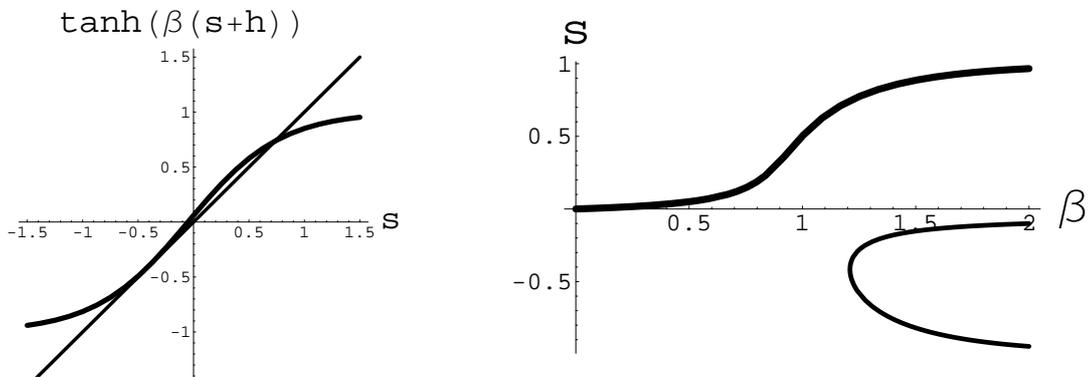


Abbildung D.3: Für äusseres Magnetfeld $h = 1/20$ und $\beta_{\text{cr}}^M = 1$: Links: Mean Field-Gleichung (für $\beta = 1.2$). Rechts: Ihre stabile Lösung (fett) bzw. instabilen Lösungen (dünn) als Funktion der inversen Temperatur β .

Für $\beta < \beta_{\text{cr}}^M$ läßt sich die so genannte *Suszeptibilität*

$$\chi(\beta) := D_2 s(\beta, 0),$$

die Ableitung der mittleren Magnetisierung nach dem äusseren Magnetfeld h , durch partielle Ableitung der Mean-Field-Gleichung

$$\tanh\left(\beta\left(\frac{s(\beta, h)}{\beta_{\text{cr}}^M} + h\right)\right) = s(\beta, h)$$

nach h , dem 2. Argument von s , berechnen. Es ergibt sich

$$\frac{\beta(D_2 s(\beta, 0)/\beta_{\text{cr}}^M + 1)}{\cosh\left(\frac{\beta}{\beta_{\text{cr}}^M} s(\beta, 0)\right)^2} = D_2 s(\beta, 0)$$

also wegen $s(\beta, 0) = 0$ die Identität $\beta(\chi(\beta)/\beta_{\text{cr}}^M + 1) = \chi(\beta)$ oder

$$\chi(1/T) = \frac{1}{T - T_{\text{cr}}^M} \quad (T > T_{\text{cr}}^M := 1/\beta_{\text{cr}}^M),$$

das so genannte *Curie-Weiss-Gesetz*. Dieses beschreibt die paramagnetischen Eigenschaften ferromagnetischer Stoffe oberhalb der Curie-Temperatur und wird also durch die mean-field-Theorie vorausgesagt.

In diesem Beispiel sagt die Mean Field-Approximation für alle Dimensionen einen Phasenübergang voraus, obwohl wir wissen, dass für $d = 1$ das Isingmodell keinen Phasenübergang besitzt.

Andererseits ist bekannt, dass die kritische Temperatur T_{cr} der Mean-Field-Theorie die wirkliche kritische Temperatur des d -dimensionalen Isingmodells (unterhalb derer spontane Magnetisierung auftritt) majorisiert und im Limes $d \rightarrow \infty$ approximiert. Siehe SIMON [Sim], Kapitel II für eine weiterführende Diskussion.

E Markov-Ketten

Wir beschränken uns hier auf endliche Markov-Ketten, mit einer nicht leeren endlichen Menge S als *Zustandsraum*. Wann immer nötig, setzen wir

$$S = \{1, \dots, N\}.$$

Damit können wir eine Wahrscheinlichkeitsverteilung

$$p : S \rightarrow [0, 1] \quad , \quad \sum_{i \in S} p(i) = 1$$

als Zeilenvektor $p = (p_1, \dots, p_N)$ der Länge N auffassen, genannt *Wahrscheinlichkeitsvektor*.

Eine reelle Matrix $P = (p_{ij})_{i,j \in S}$ heißt *stochastische Matrix*, wenn ihre Zeilen Wahrscheinlichkeitsvektoren sind, d.h.

$$p_{i,j} \geq 0 \quad , \quad \sum_{j \in S} p_{i,j} = 1 \quad (i \in S). \quad (\text{E.1})$$

Damit ist das Produkt pP eines Wahrscheinlichkeitsvektors und einer stochastischen Matrix wieder ein Wahrscheinlichkeitsvektor:

$$\sum_{j \in S} (pP)(j) = \sum_{j \in S} \sum_{i \in S} p_i p_{i,j} = \sum_{i \in S} p_i \left(\sum_{j \in S} p_{i,j} \right) = \sum_{i \in S} p_i = 1.$$

Also ist auch das Produkt stochastische Matrizen stochastisch.

E.1 Definition Es sei $(\Omega, \mathcal{F}, \mathbb{P})$ der Wahrscheinlichkeitsraum $\Omega := S^{\mathbb{N}_0}$ mit Produkt- σ -Algebra \mathcal{F} der σ -Algebren 2^S , und Zufallsvariablen

$$X_t : \Omega \rightarrow S \quad , \quad X_t(\omega) := \omega_t \quad (t \in \mathbb{N}_0).$$

Gilt dann für alle Zeiten $t \in \mathbb{N}$ und $s_0, \dots, s_{t+1} \in S$

$$\mathbb{P}(X_{t+1} = s_{t+1} \mid X_0 = s_0, \dots, X_t = s_t) = \mathbb{P}(X_{t+1} = s_{t+1} \mid X_t = s_t), \quad (\text{E.2})$$

dann heißt der stochastische Prozess $(\Omega, \mathcal{F}, \mathbb{P}, (X_t)_{t \in \mathbb{N}_0})$ **Markov-Kette** (mit Zustandsraum S).

E.2 Bemerkungen 1. Die Bedingung (E.2) bedeutet anschaulich, dass die Zukunft $(X_{t+1}, X_{t+2}, \dots)$ von der Vergangenheit (X_0, \dots, X_t) nur über die Gegenwart X_t abhängt.

2. Jede Markov-Kette liefert uns die Wahrscheinlichkeitsvektoren $p^{(t)}$ und stochastische Matrizen $P^{(t)}$ ($t \in \mathbb{N}$) mit Einträgen³⁹

$$p_i^{(t)} := \mathbb{P}(X_t = i) \quad , \quad P_{i,j}^{(t)} := \mathbb{P}(X_t = j \mid X_{t-1} = i) \quad (i, j \in S). \quad (\text{E.3})$$

Es ergibt sich in Matrixschreibweise

$$p^{(t)} = p^{(t-1)} P^{(t)}$$

und durch Iteration

$$p^{(t)} = p^{(0)} P^{(1)} \cdot \dots \cdot P^{(t)} \quad (t \in \mathbb{N}).$$

3. Umgekehrt können wir aus dem Satz von Kolmogorov (siehe z. B. BAUER [Ba], § 35) schließen, dass für beliebige Wahrscheinlichkeitsvektoren $p^{(0)}$ und stochastische Matrizen $P^{(t)}$ ($t \in \mathbb{N}$) eine Markovkette mit

$$\mathbb{P}(X_0 = i) = p_i^{(0)} \quad , \quad \mathbb{P}(X_{t+1} = j \mid X_t = i) = P_{i,j}^{(t)} \quad (i, j \in S)$$

existiert.

4. Durch Iteration ergibt sich die nützliche Formel

$$\mathbb{P}(X_0 = s_0, \dots, X_t = s_t) = p_{s_0}^{(0)} P_{s_0, s_1}^{(1)} \cdot \dots \cdot P_{s_{t-1}, s_t}^{(t)},$$

Die Markov-Kette heißt *homogen*, wenn die stochastischen Matrizen $P^{(t)}$ vom Zeitparameter $t \in \mathbb{N}$ unabhängig sind. Wir lassen ihn dann weg. In diesem Fall ist die Markov-Kette durch das Paar

$$(p, P),$$

bestehend aus Startwahrscheinlichkeit und stochastischer Matrix, festgelegt.

³⁹Zumindest wenn für die Bedingung von (E.3) gilt: $\mathbb{P}(X_{t-1} = i) > 0$. Sonst kann man die Matrixeinträge von P ohne Gefahr so *wählen*, dass die Bedingung (E.1) erfüllt ist.

E.3 Beispiel (Zyklische Irrfahrt) Es sei S die N -elementige Restklassengruppe $S := \mathbb{Z}/N\mathbb{Z}$. Dies wird als Eckenmenge eines Graphen mit Kantenmenge $E := \{\{i, i+1\} \mid i \in S\}$ aufgefasst, was geometrisch einem N -eckigen Polygon entspricht.

Ein Teilchen befinde sich zum Zeitpunkt $t = 0$ mit Wahrscheinlichkeit $p_k^{(0)}$ am Punkt $k \in S$.

Zu jedem Zeitpunkt t springe das Teilchen mit Wahrscheinlichkeit $1/2$ um eine Position im Uhrzeigersinn bzw. im Gegenuhrzeigersinn. Dies wird durch die Übergangsmatrix P mit Einträgen

$$p_{i,j} := \begin{cases} 1/2 & , \{i, j\} \in E \\ 0 & , \text{sonst} \end{cases}$$

modelliert.

Durch Fouriertransformation auf S mit unitärer Matrix

$$F \in \mathcal{M}(N, \mathbb{C}) \quad , \quad (F)_{j,k} := N^{-1/2} \exp(-2\pi i j k / N)$$

(siehe Anhang A) wird die Matrix P diagonalisiert:

$$F P F^{-1} = D := \text{diag}(\lambda_1, \dots, \lambda_N)$$

mit den Eigenwerten $\lambda_k = \cos(2\pi k / N)$ von P . Damit ist nach t Iterationen die Wahrscheinlichkeitsverteilung $p^{(t)} = p^{(0)} P^t$ mit $P^t = F^{-1} D^t F$. Es gilt $\lambda_N \equiv \lambda_0 = 1$ und $\lambda_k = \lambda_{N-k} \equiv \lambda_{-k}$. Die Vektoren

$$v_k := (v_{k,1}, \dots, v_{k,N}) \quad \text{mit} \quad v_{k,l} := N^{-1} e^{2\pi i k l / N}.$$

sind die Eigenvektoren von P zu den Eigenwerten λ_k , und es gilt die Normierung $\|v_k\|_1 = 1$. Damit ist mit der Orthogonalprojektion $\pi_k \in \mathcal{M}(N, \mathbb{C})$ auf v_k die symmetrische Matrix P von der Form

$$P = \sum_{k \in S} \lambda_k \pi_k,$$

und

$$P^t = \sum_{k \in S} \lambda_k^t \pi_k \quad (t \in \mathbb{N}). \quad (\text{E.4})$$

- Ist nun N ungerade, dann besitzt für $k \neq 0$ der Eigenwert $\lambda_k \equiv \cos(2\pi k / N)$ einen Betrag < 1 , und aus (E.4) folgt

$$\lim_{t \rightarrow \infty} P^t = \pi_0.$$

Für jede Anfangsverteilung $p^{(0)}$ strebt also $p^{(t)} = p^{(0)} P^t$ gegen die Gleichverteilung, siehe Abb. E.1 für $N = 31$ und $p^{(0)} := \delta_{15}$.

- Dagegen ist für $N = 2m$ der Eigenwert $\lambda_m = -1$, und gemäß (E.4)

$$\lim_{t \rightarrow \infty} (P^t - (\pi_0 + (-1)^t \pi_m)) = 0.$$

Ist daher die Startverteilung auf einem Punkt $k \in S$ konzentriert, also von der Form $p^{(0)} = \delta_k$, dann gilt $p^{(0)}\pi_m = (-1)^k v_k$. Die Wahrscheinlichkeitsverteilung $p^{(t)} = p^{(0)}P^t \sim v_0 + (-1)^{t+k}v_m$ springt also asymptotisch zwischen der Gleichverteilung auf den geraden und der auf den ungeraden $k \in S$.

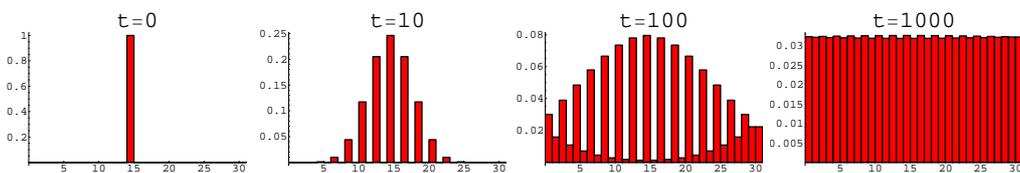


Abbildung E.1: Wahrscheinlichkeitsverteilung der Markovkette für ungerades N zu verschiedenen Zeiten t

Allgemein können wir einer stochastischen Matrix P auf dem Zustandsraum S einen Graphen (S, E) mit der Menge $E := \{(i, k) \in S \times S \mid p_{i,k} > 0\}$ (gerichteter Kanten) zuordnen.

Eine Folge $(i_0, \dots, i_n) \in S^{n+1}$ von Vertices $i_k \in S$ wird also genau dann eine positive Wahrscheinlichkeit

$$p_{i_0} p_{i_0, i_1} \cdots p_{i_{n-1}, i_n} > 0$$

zugeordnet, wenn $p_{i_0} > 0$ gilt und die Folge ein Kantenzug (der Länge n) im Graph ist, d.h. $(i_{k-1}, i_k) \in E$ für $k = 1, \dots, n$.

E.4 Definition Die stochastische Matrix P heißt

- **irreduzibel**, wenn für alle $i, k \in S$ ein $n \in \mathbb{N}$ existiert mit $(P^n)_{i,k} > 0$,
- **irreduzibel-aperiodisch**, wenn für ein $n \in \mathbb{N}$ gilt: $(P^n)_{i,k} > 0$ ($i, k \in S$).

Letzteres bedeutet für den Graphen (S, E) , dass man je zwei Vertices mit einem Kantenzug der Länge n verbinden kann. Dies ist für das Beispiel der zyklischen Irrfahrt genau dann der Fall, wenn N ungerade ist (und für $n \geq N - 1$).

E.5 Satz (Ergodensatz für Markov-Ketten) Für eine irreduzibel-aperiodische stochastische Matrix P existiert ein eindeutiger Wahrscheinlichkeitsvektor p mit

$$pP = p.$$

Dieser besitzt nur Einträge $p_k > 0$, und für jeden Wahrscheinlichkeitsvektor $p^{(0)}$ gilt

$$\lim_{t \rightarrow \infty} p^{(0)} P^t = p.$$

Bew.: Nach dem Satz von Perron–Frobenius (Anhang F) existiert für die stochastische Matrix $Q := P^n \in \mathcal{M}(N, \mathbb{C})$ ein eindeutiger Eigenwert $\lambda > 0$ maximalen Betrages. Da dieser gleich dem Spektralradius von Q , also gleich $\lim_{k \rightarrow \infty} \|Q^k\|^{1/k} = 1$ ist, folgt $\lambda = 1$. Der zugehörige Eigenvektor kann nach dem Satz von Perron–Frobenius so gewählt werden, dass $p_k > 0$ gilt. Nach Normierung auf $\|p\|_1 = 1$ ist er damit eindeutig. Damit ist p aber auch Eigenvektor von P zum Eigenwert 1, und alle anderen Eigenwerte von P besitzen echt kleineren Betrag.

Ist $J \in \mathcal{M}(N, \mathbb{C})$ eine Jordansche Normalform von P , also $P = W J W^{-1}$ und $J = \bigoplus_{\lambda \in \text{spec}_{\mathbb{C}}(P)} J_{\lambda}$ mit Jordanblöcken $J_{\lambda} = \lambda \mathbb{1}_{d(\lambda)} + \mathcal{N}$ und der nilpotenten Matrix $\mathcal{N} \in \mathcal{M}(d(\lambda), \mathbb{C})$, dann ist die Dimension $d(1)$ des Eigenraumes zum Eigenwert 1 gleich $\mathbb{1}$. Wegen

$$P^t = W J^t W^{-1} \quad \text{und} \quad J_{\lambda}^t = \sum_{l=0}^t \binom{t}{l} \lambda^{t-l} \mathcal{N}^l = \lambda^{t-d(\lambda)} \sum_{l=0}^{d(\lambda)} \binom{t}{l} \lambda^{d(\lambda)-l} \mathcal{N}^l$$

ist für alle von 1 verschiedenen Eigenwerte λ , also $|\lambda| < 1$:

$$\lim_{t \rightarrow \infty} J_{\lambda}^t = 0.$$

Die Matrix P^{∞} projiziert also jeden Zeilenvektor auf den von p aufgespannten Unterraum und ist damit von der Form $P^{\infty} = \begin{pmatrix} l_1 p \\ \vdots \\ l_N p \end{pmatrix}$ mit reellen Koeffizienten l_k . Da P^{∞} als Limes stochastischer Matrizen stochastisch ist, gilt $l_k = 1$. \square

Manchmal kann man den Perron–Frobenius–Eigenvektor p der stochastischen Matrix P ansehen.

E.6 Definition Existiert ein Wahrscheinlichkeitsvektor $q \in \mathbb{R}^N$ mit

$$q_i p_{i,j} = q_j p_{j,i} \quad (i, j \in S),$$

dann heißt die Markovkette (q, P) **reversibel**⁴⁰.

E.7 Lemma Für eine reversible Markovkette (q, P) ist q Linkseigenvektor von P zum Eigenwert 1.

⁴⁰In der englischsprachigen Literatur nennt man die Bedingung auch *equation of detailed balance*.

Bew.: Für alle $j \in S$ gilt $(qP)_j = \sum_{i \in S} q_i p_{i,j} = \sum_{i \in S} q_j p_{j,i} = q_j$. \square

Ist beispielsweise jeder Eintrag von P positiv, dann ergibt sich für den Perron-Frobenius-Eigenvektor $p = q$ der reversiblen Markovkette (q, P) die Formel

$$p_i = p_1 \frac{p_{1,i}}{p_{i,1}} \quad (i \in S),$$

aus der man den Eigenvektor (bis auf seine Normierung) erhält.

Insbesondere ist jede *symmetrische* stochastische Matrix reversibel bezüglich des Eigenvektors mit konstanten Einträgen $p_i = 1/N$.

Auf dem Messraum $\Omega = S^{\mathbb{N}_0}$ der Folgen $\omega = (\omega_1, \omega_2, \dots)$ betrachten wir die (einseitige) *Shift*-Abbildung

$$\sigma : \Omega \rightarrow \Omega \quad , \quad \sigma(\omega)_t = \omega_{t+1} \quad (t \in \mathbb{N}).$$

Diese ist messbar, und das Wahrscheinlichkeitsmaß \mathbb{P} der irreduziblen Markovkette (p, P) ist invariant unter dem Shift, d.h. $\mathbb{P}(\sigma^{-1}(A)) = \mathbb{P}(A)$ für alle Ereignisse $A \in \mathcal{F}$. Dies kann man überprüfen, indem man für A die Zylindermengen $A_{\tau_1, \dots, \tau_k} := \{\omega \in \Omega \mid \omega_i = \tau_i, i = 1, \dots, k\}$ einsetzt, denn diese erzeugen die σ -Algebra \mathcal{F} . Wegen $\sigma^{-1}(A_{\tau_1, \dots, \tau_k}) = \bigcup_{i=1}^N A_{i, \tau_1, \dots, \tau_k}$ ist

$$\begin{aligned} \mathbb{P}(\sigma^{-1}(A_{\tau_1, \dots, \tau_k})) &= \sum_{i=1}^N \mathbb{P}(A_{i, \tau_1, \dots, \tau_k}) \\ &= \sum_{i=1}^N p_i p_{i, \tau_1} p_{\tau_1, \tau_2} \cdots p_{\tau_{k-1}, \tau_k} \\ &= p_{\tau_1} p_{\tau_1, \tau_2} \cdots p_{\tau_{k-1}, \tau_k} = \mathbb{P}(A_{\tau_1, \dots, \tau_k}), \end{aligned}$$

wobei benutzt wurde, dass $pP = p$ gilt.

E.8 Satz Falls die stochastische Matrix P irreduzibel-aperiodisch mit Perron-Frobenius-Eigenvektor p ist, dann ist die homogene Markovkette **mischend** bezüglich σ , d.h.

$$\lim_{t \rightarrow \infty} \mathbb{P}(\sigma^{-t}(A) \cap B) = \mathbb{P}(A)\mathbb{P}(B) \quad (A, B \in \mathcal{F}). \quad (\text{E.5})$$

Bew.: Wieder können wir die Behauptung für Zylindermengen überprüfen, d.h. ansetzen

$$A := A_{\tau_1, \dots, \tau_k} \quad , \quad B := A_{\mu_1, \dots, \mu_l}.$$

Damit ist für $t > l$ und $r := t - l - 1$

$$\sigma^{-t}(A) \cap B = \bigcup_{i_1, \dots, i_r} A_{\mu_1, \dots, \mu_l, i_1, \dots, i_r, \tau_1, \dots, \tau_k}$$

also

$$\begin{aligned}\mathbb{P}(\sigma^{-t}(A) \cap B) &= \sum_{i_1, \dots, i_r} p_{\mu_1} p_{\mu_1, \mu_2} \cdots p_{\mu_l, i_1} \cdots p_{i_r, \tau_k} \cdots p_{\tau_{k-1} \tau_k} \\ &= p_{\mu_1} p_{\mu_1, \mu_2} \cdots p_{\mu_{l-1}, \mu_l} (P^{r+1})_{\mu_l, \tau_1} p_{\tau_1, \tau_2} \cdots p_{\tau_{k-1}, \tau_k}.\end{aligned}\quad (\text{E.6})$$

Es ist aber $\lim_{s \rightarrow \infty} (P^s)_{m,n} = p_n$. Einsetzen in (E.6) ergibt wegen

$$\mathbb{P}(A) = p_{\mu_1} p_{\mu_1, \mu_2} \cdots p_{\mu_{l-1}, \mu_l} \quad \text{und} \quad \mathbb{P}(B) = p_{\tau_1} p_{\tau_1, \tau_2} \cdots p_{\tau_{k-1}, \tau_k}$$

die Formel (E.5). □

F Der Satz von Frobenius und Perron

Es sei $P = (p_{i,j})_{i,j=1}^N$ eine $N \times N$ -reelle Matrix mit Einträgen $p_{i,j} \geq 0$ und der Eigenschaft, dass für ein geeignetes $k \in \mathbb{N}$ die Matrix P^k nur positive Einträge besitzt.

F.1 Satz (Perron-Frobenius) Für die Menge $\text{spec}(P) \subset \mathbb{C}$ der komplexen Eigenwerte von P gilt:

1. Es existiert ein ausgezeichneteter Eigenwert $\lambda_{\text{PF}} > 0$ (genannt **Perron-Frobenius-Eigenwert** mit algebraischer Multiplizität 1 und Eigenvektor $v_{\text{PF}} \in \mathbb{R}^N$, dessen Einträge positiv sind.
2. Alle Eigenwerte $\lambda \in \text{spec}(P) \setminus \{\lambda_{\text{PF}}\}$ haben Betrag $|\lambda| < |\lambda_{\text{PF}}|$.
3. Es gilt $\min_i \sum_{j=1}^N p_{i,j} \leq \lambda_{\text{PF}} \leq \max_i \sum_{j=1}^N p_{i,j}$.

Bew.: • Wir betrachten zunächst den Fall positiver Einträge ($p_{i,j} > 0$).

Die durch P auf \mathbb{R}^N definierte lineare Abbildung bildet den positiven Kegel

$$K := \{v \in \mathbb{R}^N \setminus \{0\} \mid \forall i \in \{1, \dots, n\} : v_i \geq 0\}$$

in sich ab. Im Gegensatz zu K ist der Simplex

$$S := \{v \in K \mid \|v\|_1 = 1\}$$

kompakt. Er hat die Eigenschaft $K = \{\lambda v \mid \lambda > 0, v \in S\}$. Die stetige Funktion

$$f : K \rightarrow (0, \infty) \quad , \quad f(v) := \min_{i: v_i > 0} \frac{(Pv)_i}{v_i}$$

ist homogen vom Grad 0, nimmt also auf S ihr Maximum λ_{PF} an.

• Sei $v_{\text{PF}} \in S$ eine Maximalstelle von f . Dann ist v_{PF} Eigenvektor von P zum Eigenwert λ_{PF} : Nach Definition von f ist nämlich

$$(Pv_{\text{PF}})_i \geq \lambda_{\text{PF}}(v_{\text{PF}})_i \quad (i = 1, \dots, N),$$

Wäre v_{PF} kein Eigenvektor, dann gäbe es einen Index j mit $(Pv_{\text{PF}})_j > \lambda_{\text{PF}}(v_{\text{PF}})_j$. Dann würde (wegen Positivität der j -ten Spalte von P) für den Vektor $w := Pv_{\text{PF}} \in K$ gelten:

$$\left(P(w - \lambda_{\text{PF}} v_{\text{PF}}) \right)_i > 0 \quad (i = 1, \dots, N),$$

also $(Pw)_i > \lambda_{\text{PF}} w_i > 0$ ($i = 1, \dots, N$) oder $f(w) > \lambda_{\text{PF}}$, im Widerspruch zur Definition von λ_{PF} . Dass die algebraische Multiplizität Eins ist, kann man z.B. in [Ga] nachlesen.

• Es seien $\min, \max \in \{1, \dots, N\}$ so gewählt, dass für $v = v_{\text{PF}}$ gilt: $v_{\min} = \min_i v_i$ und $v_{\max} = \max_i v_i$.

Damit ist

$$\lambda_{\text{PF}} v_{\min} = \sum_{j=1}^N p_{\min,j} v_j \geq v_{\min} \sum_{j=1}^N p_{\min,j} \geq v_{\min} \min_i \sum_{j=1}^N p_{i,j},$$

also $\lambda_{\text{PF}} \geq \min_i \sum_{j=1}^N p_{i,j}$ und (unter Verwendung von v_{\max}) $\lambda_{\text{PF}} \leq \max_i \sum_{j=1}^N p_{i,j}$. Dies zeigt 3.

• Es sei nun $\lambda \in \text{spec}(P)$ mit Eigenvektor $v \in \mathbb{C}^N \setminus \{0\}$. Für den minimalen Diagonaleintrag $d_{\min} > 0$ von P gilt $(p - d_{\min} \mathbb{1})v = (\lambda - d_{\min})v$, also

$$\sum_{j=1}^N (p_{i,j} - d_{\min} \delta_{i,j}) |v_j| \geq |\lambda - d_{\min}| |v_i| \quad (i = 1, \dots, N),$$

also $\sum_{j=1}^N p_{i,j} |v_j| \geq (|\lambda - d_{\min}| + d_{\min}) |v_i|$ und damit nach Definition von f

$$|\lambda - d_{\min}| + d_{\min} \leq \lambda_{\text{PF}}.$$

Andererseits ist nach der Dreiecksungleichung $|\lambda| \leq |\lambda - d_{\min}| + d_{\min}$, also $|\lambda| \leq \lambda_{\text{PF}}$. Für nichtpositive λ ist die Dreiecksungleichung strikt, sodass entweder $\lambda = \lambda_{\text{PF}}$ oder $|\lambda| < \lambda_{\text{PF}}$ gilt. Dies zeigt 2.

• Sind nun die Einträge von P nichtnegativ ($p_{i,j} \geq 0$), aber die von P^k positiv, dann findet man ein $\lambda_{\text{PF}} > 0$ und ein v_{PF} mit positiven Einträgen, sodass $P^k v_{\text{PF}} = \lambda_{\text{PF}}^k v_{\text{PF}}$. Eine k -te Einheitswurzel von λ_{PF}^k muss Eigenwert von P sein. Da λ_{PF}^k algebraische Multiplizität eins besitzt, muss auch $P v_{\text{PF}} = \lambda_{\text{PF}} v_{\text{PF}}$ gelten. Da alle anderen Eigenwerte von P^k echt kleineren Betrag als λ_{PF}^k haben, gilt auch für alle $\lambda \in \text{spec}(P) \setminus \{\lambda_{\text{PF}}\}$, dass $|\lambda| < \lambda_{\text{PF}}$. \square

- F.2 Bemerkungen**
1. Der obige Beweis lehnt sich an den in Kapitel 3.A von [Ge] an. Einen anderen Ansatz findet man z.B. im Buch [Ga] von GANTMACHER.
 2. Offensichtlich besitzt die Matrix P auch einen positiven Links-Eigenvektor v_L zum Eigenwert λ_{PF} . Unter der Normierungsbedingung $\|v_L\|_1 = 1$ ist dieser eindeutig. Ist P eine stochastische Matrix, dann gilt nach Teil 3 des Satzes $\lambda_{\text{PF}} = 1$, und v_L kann als die eindeutige invariante Wahrscheinlichkeitsverteilung der Markov-Kette mit Übergangsmatrix P interpretiert werden, siehe Anhang E.
 3. Im Kontext der Statistischen Mechanik kann der Satz von Perron-Frobenius auf Transfermatrizen angewandt werden.
In der Quantenmechanik benutzt man eine Verallgemeinerung des Satzes um zu zeigen, dass unter bestimmten Umständen der Grundzustand eindeutig ist, d.h. für den Hamiltonoperator H gilt: $\inf \text{spec}(H)$ ist ein Eigenwert der Multiplizität 1 (siehe [RS4], Kapitel XIII.12).

Literatur

- [Ar] H. Araki: Conditional Expectations Relative to a Product State and the Corresponding Standard Potentials. *Communications in Mathematical Physics* **246**, 113–132 (2004)
- [AA] V.I. Arnol'd, A. Avez: *Ergodic Problems of Classical Mechanics*. Reading: Benjamin 1968
- [Ba] H. Bauer: *Wahrscheinlichkeitstheorie*. Berlin: de Gruyter 1991
- [Bax] R.J. Baxter: *Exactly Solved Models in Statistical Mechanics*. New York: Academic Press 1982
- [Be] H. van Beijeren: Interface Sharpness in the Ising System. *Communications in Mathematical Physics* **40**, 1–6 (1975)
- [BR] O. Bratteli, D. Robinson: *Operator Algebras and Quantum Statistical Mechanics*, Vol. I und II. Berlin, Heidelberg, New York: Springer 1987, 1997
- [Ch] D. Chandler: *Introduction to Modern Statistical Mechanics*. Oxford University Press 1987
- [Da] K. Davidson: *C^* -Algebras by Example*. American Mathematical Society 1996
- [ES] R. G. Edwards, A. D. Sokal: Generalization of the Fortuin–Kasteleyn–Swendsen–Wang representation and Monte Carlo algorithm. *Physical Review D*, **38**, No. 6., 2009–2012 (1988)
- [Fa] K. Falconer: *Techniques in Fractal Geometry*. Chichester: John Wiley 1997
- [FKT] J. Feldmann, H. Knörrer, E. Trubowitz: A Two-dimensional Fermi Liquid, Part I–III. *Commun. Math. Phys.* **247**, 1–177 (2004)
- [Ga] F. R. Gantmacher: *Matrizentheorie*. Berlin, Heidelberg, New York: Springer 1986
- [Ge] H-O. Georgii: *Gibbs Measures and Phase Transitions*. Berlin: de Gruyter 1988
- [GJ] J. Glimm, A. Jaffe: *Quantum Physics*. Berlin, Heidelberg, New York: Springer 1981

- [Gr] R. Griffiths: Rigorous Results and Theorems. Kapitel 2 von: C. Domb and M. Green, eds.: Phase Transitions and Critical Phenomena, Vol. 1. San Diego: Academic Press 1972
- [Gri1] G. Grimmett: Percolation. Grundlehren der mathematischen Wissenschaften, Vol. 321. Berlin, Heidelberg, New York: Springer, 2nd ed. 1999
- [Gri2] G. Grimmett: The Random-Cluster Model. Grundlehren der mathematischen Wissenschaften, Vol. 333. Berlin, Heidelberg, New York: Springer 2006
- [Is] R.B. Israel: Convexity in the Theory of Lattice Gases. Princeton: Princeton University Press 1979
- [ID] C. Itzykson, J.-M. Drouffe: Statistical Field Theory. Band 1 und 2. Cambridge: Cambridge University Press 1995
- [Ja] K. Jänich: Topologie. Berlin, Heidelberg, New York: Springer 1987
- [Ke] G. Keller: Equilibrium states in ergodic theory. Cambridge: Cambridge University Press 1998
- [LaBi] D.P. Landau, K. Binder: Monte Carlo Simulations in Statistical Physics. Cambridge: Cambridge University Press 2000
- [LaLi] L.D. Landau, E.M. Lifschitz: Lehrbuch der Theoretischen Physik. Band V: Statistische Physik. Berlin: Akademie-Verlag 1979
- [LSSY] E. Lieb, R. Seiringer, J.P. Solovej, J. Yngvason: The mathematics of the Bose gas and its condensation. Oberwolfach Seminars 34. Basel: Birkhäuser, 2005
- [Ma] N. Madras: Lectures on Monte Carlo Methods. American Mathematical Society. 2002
- [Ne] Ch. Newman: Zeros of the Partition Function for Generalized Ising Systems. Communications on Pure and Applied Mathematics **27**, 143–159 (1974)
- [PW] J. G. Propp, D. B. Wilson: Exact Sampling with Coupled Markov Chains and Application to Statistical Mechanics. Random Structures and Algorithms **9**, 223-252 (1996)
- [PF] B. Prum, J. Fort: Stochastic Processes on a Lattice and Gibbs Measures. Dordrecht: Kluwer 1991

- [RS] M. Reed, B. Simon: *Methods of Modern Mathematical Physics, Vol. I: Functional Analysis*. San Diego: Academic Press 1992
- [RS4] M. Reed, B. Simon: *Methods of modern mathematical physics, Vol. IV: Analysis of operators*. New York: Academic Press 1978
- [Rud] W. Rudin: *Fourier Analysis on Groups*. Interscience Publishers. New York: 1962
- [Ru] D. Ruelle: *Statistical Mechanics: Rigorous Results*. Reading: Addison Wesley 1989
- [Ru2] D. Ruelle: Is Our Mathematics Natural? The Case of Equilibrium Statistical Mechanics. *Bull. AMS* **19**, 259–268 (1988)
- [Se] G. L. Sewell: *Quantum Theory of Collective Phenomena*. Oxford: Clarendon Press 1991
- [Sim] B. Simon: *The Statistical Mechanics of Lattice Gases, Vol. I*. Princeton: Princeton University Press 1993
- [Si] N. Simányi: Proof of the Boltzmann-Sinai ergodic hypothesis for typical hard disk systems. *Invent. Math.* **154**, 123–178 (2003)
- [Sin] Y. Sinai: *Theory of Phase Transitions: Rigorous Results*. Pergamon Press, Koedition mit Akadémiai Kiadó. 1982
- [So] A. D. Sokal: *Monte Carlo methods in statistical mechanics: Foundations and new algorithms*. 1989. Lecture notes from Cours de Troisième Cycle de la Physique en Suisse Romande.
- [StWi] R. Streater, A. Wightman: *PCT, spin and statistics, and all that*. Princeton Landmarks in Physics. Princeton, NJ: Princeton University Press, 2000
- [SwWa] R. H. Swendsen, J.-S. Wang: Nonuniversal Critical Dynamics in Monte Carlo Simulations. *Physical Review Letters*, **58**, No. 2, 86–88 (1987)
- [Sz] F. Szász: Boltzmann's ergodic hypothesis, a conjecture for centuries? *Stud. Sci. Math. Hung.* **31**, 299–322 (1996)
- [Sz2] F. Szász, in: *Hard Ball Systems and the Lorentz Gas*. Encyclopaedia of Mathematical Sciences, Vol. 101. Berlin: Springer, 2000
- [Th] W. Thirring: *Lehrbuch der Mathematischen Physik, Band 4. Quantenmechanik großer Systeme*. Wien: Springer 1980

- [TKS] M. Toda, R. Kubo, N. Saitô: Statistical Physics I. Springer Series in Solid State Sciences 30. Berlin: Springer 1992
- [Wa] P. Walters: An Introduction to Ergodic Theory. Graduate Texts in Mathematics, Vol. 79. Berlin, Heidelberg, New York: Springer 1982
- [Za] M. Zaharadnik: A short course of the Pirogov-Sinai theory. *Rendiconti de Matematica* **18**, 411–486 (1998)

Index

- Aktivität 113
- Algebra 21
- Asano-Kontraktion 114
- Binomial- (Bernoulli-) Verteilung 11
- Boltzmann-Statistik 186
- Borelmenge 21
- Bose-Einstein-Statistik 186
- Bose-Einstein-Kondensation 194
- Bosonen 185
- C^* -Algebra 30
- Cantormenge 51
- Cramér-Transformierte 17, 25
- detailed balance 213
- Dichtematrix 32
- Dulong-Petitsche Regel 35
- diskreter Wahrscheinlichkeitsraum 15
- Elementarereignis 15, 22
- Entropie 38
 - Boltzmann 16
 - Shannon 38
 - v. Neumann 38
- Ereignis 15, 22
 - Wahrscheinlichkeit 15, 22
 - unabhängig 16
- ergodisch 174
- Erwartungswert 22
- Fermi-Dirac-Statistik 186
- Fermionen 185
- Fock-Raum 186
- Fouriertransformation 47, 200
- Freie Energie 60
- Gibbsmaß 18, 85, 91, 93
 - nicht translationsinvariantes 93
 - reines 91
- Gibbszustand 32, 43
 - großkanonischer 43, 186
 - kanonischer 43
- GKS-Ungleichung 104
- Glauber-Dynamik 162
- Graph
 - ungerichteter 80
 - gerichteter 212
- Große Abweichungen 13
- großkanonisches Ensemble 43, 186
- Grundzustandskonfiguration 100
- harmonischer Oszillator
 - klassischer 20
 - quantenmechanischer 33, 147
 - Vergleich 35
- Homöomorphismus 51
- Hochtemperaturentwicklung 126
- Huffman-Code 39
- irreduzibel 212
- Irrfahrt 211
- Isingmodell 55, 77
 - 1-dimensionales 46, 71, 103
 - 2-dimensionales 91, 94, 129, 135
 - 3-dimensionales 108
 - d -dimensionales 100, 122
- KMS-Zustand 148
- Konfiguration 22
- Kontur 96, 101
- Korrelationsfunktion 102
- Korrelationslänge 104
- kritischer Punkt 75
- magnetfeld 18
- makroskopische Observablen 57
- Markovkette 209
- metastabile Zustände 164
- Metropolis-Algorithmus 161
- Mikrokanonisches Ensemble 172
- mikroskopische Observablen 58
- mischend 214
- mittlere Magnetisierung 18, 58, 92
- Modell 5
 - Curie-Weiss 24

diskretes gaußsches 89
 integrables 129
 Ising: unter Isingmodell
 Heisenberg 149
 für KH_2PO_4 79
 Potts 56, 165
 random cluster 166
 Observable 29, 30
 lokale 59
 makroskopische 57
 mikroskopische 58
 quasilokale 59
 Observablenalgebra 36, 86, 122
 Pauli-Prinzip 188
 Peierls-Ungleichung 96
 Phase 92
 Phasenkoexistenz 74, 148
 Phasenraum 28, 150
 Phasenübergang 5
 Ordnung 77
 Phasenübergangspunkt 77
 proposal matrix 162
 Potential 54
 antiferromagnetisches 55, 126
 ferromagnetisches 54, 119
 Nächste-Nachbar- 54
 Paar- 54, 119
 Reichweite eines P. 54
 translationsinvariantes 54
 Randbedingung 53, 87
 freie 53
 periodische 78
 positive 95
 Ratenfunktion 17, 25
 reversibel 213
 Satz von
 Banach und Alaoglu 87
 BLT 124
 Dubrushin und van Beijeren 108
 Hurwitz 120
 Griffiths, Kelly und Sherman 104
 Klein 40
 Kolmogorov 56
 Krein und Milman 92
 Lee und Yang 118
 de Moivre und Laplace 16
 Onsager 135
 Perron und Frobenius 215
 Riesz und Markov 87
 Tychonoff 52
 Vitali 120
 σ -Algebra 21
 Simplex 37, 92
 Spin
 klassischer 18
 quantenmechanischer 30
 Quantisierung 44
 spontane Magnetisierung 91, 98, 106,
 107, 144, 149
 spontane Symmetriebrechung 107
 Spurzustand 37, 43
 Sterlingsche Formel 13
 stochastische Matrix 209
 Streuung 10
 Symmetrie 107
 Teilchenzahloperator 187
 Thermodynamik 4
 Thermodynamischer Formalismus 7, 149
 thermodynamischer Limes 5, 63
 Topologie 197
 diskrete 50
 Produkttopologie 50, 86
 schwach-*-Topologie 86
 vage 86
 Transfermatrix 72, 103, 131
 translationsinvariant 23, 54, 57
 Tripelpunkt 74
 van Hove-Limes 62
 Varianz 16
 Wahrscheinlichkeit 15, 22
 bedingte 83
 Wärmebad-Dynamik 163

Wahrscheinlichkeitsmaß 15, 21
Wechselwirkungspotential 54
Zentraler Grenzwertsatz 12, 20
Zufallsvariable 15, 22
 unabhängige 16
Zustand 22, 29, 31
 extremaler (reiner) 36
 gemischter 203
 Spurzustand 37, 43
 Temperaturzustand 145
 KMS 148
Zustandssumme 18, 21, 42
Zweitquantisierung 188

