Vorstellung des Artikels „Two-Dimensional Ising Model as a Soluble Problem of Many Fermions“

von

T. D. Schultz, D. C. Mattis, E. H. Lieb [1]

Vortrag von Björn Vogt

16. Juli 2002

Inhaltsverzeichnis

1 Einleitung

1920 entwickelte Wilhelm Lenz in Rostock eine Modellidee zur mikroskopischen Beschreibung des Ferromagnetismus [2]. Insbesondere sollte geklärt werden, wie sich eine spontane Magnetisierung ohne ein von außen angelegtes Magnetfeld ausbilden kann, was einem Phasenübergang gleichkommt. Die Grundidee bestand darin, auf Gitterplätzen lokalisierte Elemente („Spins“) mit ihren nächsten Nachbarn wechselwirken zu lassen, wobei jedes Element nur zwei Zustände einnehmen kann („Spin up“ und „Spin down“). Über die Wechselwirkung werden

gleiche Zustände benachbarter Elemente (d.h. die Parallelstellung der Spins) energetisch bevorzugt. Mittlerweile in Hamburg seinen Forschungen nachgehend, übertrug er seinem Studenten Ernst Ising die Aufgabe, dieses Modell mathematisch auszuarbeiten. Ising behandelte den eindimensionalen Fall und veröffentlichte seine Resultate 1925 [3]. Er fand keinen Phasenübergang in einer Dimension, konnte das zweidimensionale Modell allerdings nicht lösen. Die Nicht-Existenz des Phasenübergangs in einer Dimension stand in Konflikt zur damals als gültig akzeptierten Weißschen Theorie; die Tatsache, daß letztere auf der Mean-Field-Näherung (dt.: Molekularfeldnäherung) beruhende Theorie gerade die Fluktuationen vernachlässigt, die den Phasenübergang in einer Dimension verhindern, war damals noch nicht bekannt. Aus diesem Grund fand das Ising-Modell zunächst wenig Beachtung. Eine Zitierung aus dem Jahre 1928 stammt von Werner Heisenberg [4], der aufgrund des vermeintlichen Versagens des Ising-Modells eine kompliziertere Formulierung der Wechselwirkungen wählte, diese dann allerdings in der Mean-Field-Näherung behandelte; die Formulierung in [4] wird heutzutage als Heisenberg-Modell bezeichnet.
Es dauerte bis 1936, ehe man die Bedeutung der Dimension im Ising-Modell erkannte: Peierls [5] lieferte, ohne das Modell lösen zu können, den Existenzbeweis für einen Phasenübergang in zwei Dimensionen. Eine analytische Lösung zu finden, erwies sich allerdings als außerordentlich schwierig. Anfang der 40er Jahre fand man den Transfermatrixformalis [6, 7, 8] als geeignetes algebraisches Hilfsmittel. In diesem schreibt sich die Zustandssumme als Spur über eine Potenz dieser Transfermatrix: $Z = \mathrm{Sp}(V^T)$. Dahinter verbirgt sich der gedachte Übergang von Element zu Element entlang einer Linie, bestehend aus T Elementen. Auf das zweidimensionale Ising-Gitter übertragen, wird die Transfermatrix auf einer Gitterzeile definiert und wandert anschließend zeilenweise durch das gesamte Gitter (, das aus T Zeilen besteht). Innerhalb dieses Formalismus gelang es Kramers und Wannier 1941 [6], den kritischen Punkt T_C zu bestimmen. Sie verwendeten hierzu eine sog. Dualitätstransformation zwischen Hoch- und Tief-Temperaturbereich.
Diese Entwicklung gipfelte 1944 in der exakten Lösung des zweidimensionalen Ising-Modells durch Onsager [9]. Dieser Lösung muß ein hoher historischer Stellenwert zugemessen werden. Unter anderem zeigt sie, daß die statistische Physik in der Lage ist, Phasenübergänge zu beschreiben, ohne auf Näherungsmethoden zurückgreifen zu müssen, wobei das Ising-Modell bis heute das einzige nichttriviale Modell ist, bei dem dies möglich ist. Allerdings muß man sich auf zwei Dimensionen und ein verschwindendes äußeres Magnetfeld beschränken, da für die sonstigen Fälle (bis heute) keine analytische Lösung vorliegt.
Obwohl nun eine exakte Lösung zur Verfügung stand, blieb doch ein gewisses Unbehagen bezüglich der aufwendigen und schwer nachzuvollziehenden Vorgehensweise Onsagers. Eine bedeutende Vereinfachung der ursprünglichen Onsager-Lösung stammt von Bruria Kaufman [10], die mit Hilfe von Spindarstellungen eleganter und leichter nachvollziehbar dasselbe Ergebnis erzielt. Eine didaktische Aufbereitung findet man in [11, 12]. Erwähnenswert ist die Herleitung der spontanen Magnetisierung, des interessierenden Ordnungsparameters, von C. N. Yang [13] aus dem Jahre 1952, die den Phasenübergang eindeutig untermauert. In den Folgejahren kam die sog. kombinatorische Lösung auf, die auf topolo-

gischem Geschick beruht; die ersten Ideen hierzu stammen (u.a.) von Kac und Ward [14]. Eine weitere exakte Lösung des zweidimensionalen Ising-Modells, die auf einer fermionischen Darstellung beruht, stammt von Schultz, Mattis und Lieb aus dem Jahre 1964 [1] und wird im Folgenden skizziert. Insbesondere wird sich herausstellen, daß sich rein algebraische Ausdrücke aus der Onsager-Kaufman-Lösung hier wiederfinden und in der Fermion-Sprache veranschaulichen lassen.

2 Lösung des zweidimensionalen Ising-Modells mittels fermionischer Operatoren

2.1 Aufstellung der Transfermatrix über Spinoperatoren

Ausgangspunkt zur Herleitung der Transfermatrix sind die Wechselwirkungen der Ising-Spins. Im Gegensatz zu Onsager und Kaufman verwenden Schultz, Mattis und Lieb zu deren algebraischen Beschreibung nicht die klassischen Spinvariablen $s_{nm} = \pm 1$, sondern Spinoperatoren σ^x_{nm}, die die Eigenwerte ± 1 aufweisen. Über derartige Spinoperatoren ausgedrückt lauten die nach unterschiedlichen Mechanismen geordneten Wechselwirkungsterme:

$$\mathcal{H} = \sum_{n=1}^{T} \left(\mathcal{H}_n^{(1)} + \mathcal{H}_n^{(2)} + \mathcal{H}_n^{(3)} \right) \tag{1}$$

mit
$$\mathcal{H}_n^{(1)} = -\sum_m \sigma^x_{n-1,m}\ \sigma^x_{nm} \qquad \text{Kopplung in vertikaler Richtung}, \tag{2}$$

$$\mathcal{H}_n^{(2)} = -\sum_m \sigma^x_{nm}\ \sigma^x_{n,m+1} \qquad \text{Kopplung in horizontaler Richtung}, \tag{3}$$

$$\mathcal{H}_n^{(3)} = -B \sum_m \sigma^x_{nm} \qquad \text{Kopplung an externes Magnetfeld}. \tag{4}$$

Für $n = 1$ enthält $\mathcal{H}_n^{(1)}$ die Verbindung zu einer nullten Zeile; diese befinde sich in einem noch nicht näher bestimmten und frei wählbaren Reservoir.
Es folgt nun die Herleitung der Transfermatrix nach [1], die sich sehr von der bei Onsager und Kaufman unterscheidet. Insbesondere werden bei dieser Methode Spinheber (12) und Spinsenker (13) auftreten. Für einen groben Überblick des Lösungsverfahrens können die Details der nächsten Zeilen übersprungen werden; unter Beachtung von (11) kann bei (14) weitergelesen werden.
Im Folgenden bezeichne $\Sigma_n = \{\sigma^x_{n1}, \ldots, \sigma^x_{nL}\}$ als Zeilenvariable die Gesamtheit aller Spinoperatoren auf der n-ten Zeile. Der *Dichteoperator* $\rho_T(\Sigma_0, \Sigma_1, \ldots, \Sigma_T)$ für das vorliegende Ising-Gitter, bestehend aus T Zeilen plus Reservoir (Σ_0), wird gemäß

$$\rho_T\left(\Sigma_0, \Sigma_1, \ldots, \Sigma_T\right) = \exp\left(-\beta\mathcal{H}\right) \cdot \rho_0(\Sigma_0) \tag{5}$$

über den Boltzmannfaktor mit $\mathcal{H}$ aus (1) definiert und hängt von allen Zeilen ab. Die Art des Reservoirs bestimmt $\rho_0(\Sigma_0)$, welches somit frei wählbar und

daher in (5) noch offengelassen ist.
Die Zustandssumme ergibt sich dementsprechend zu

$$Z \;=\; \mathrm{Sp}_{\Sigma_0,\Sigma_1,\ldots,\Sigma_T}\left[\rho_T(\Sigma_0,\Sigma_1,\ldots,\Sigma_T)\right] . \tag{6}$$

Die weitere Herleitung benötigt den Begriff des *reduzierten Dichteoperators* $\rho_T(\Sigma_T)$. Dieser *hängt nur noch von der letzten Zeile ab* und ergibt sich durch Spurbildung über die restlichen Zeilen:

$$\rho_T(\Sigma_T) \;=\; \mathrm{Sp}_{\Sigma_0,\Sigma_1,\ldots,\Sigma_{T-1}}\left[\rho_T(\Sigma_0,\Sigma_1,\ldots,\Sigma_T)\right] . \tag{7}$$

Für die Zustandssumme verbleibt somit nur noch die Spurbildung über gerade diese letzte Zeile:

$$Z \;=\; \mathrm{Sp}_{\Sigma_T}\left[\rho_T(\Sigma_T)\right] . \tag{8}$$

Die Idee ist nun, eine Rekursionsformel für den reduzierten Dichteoperator zu finden, die das Ising-Gitter „um eine Zeile kürzt“ :

$$\rho_T(\Sigma_T) \;=\; \mathcal{O}\,\rho_{T-1}(\Sigma_T)\,. \tag{9}$$

$\rho_T(\Sigma_T)$ beschreibt die Konfigurationen eines Ising-Gitters mit T Zeilen plus Reservoir, $\rho_{T-1}(\Sigma_T)$ diejenigen bei $(T-1)$ Zeilen plus Reservoir. Die fehlenden Konfigurationen sollen in (9) von dem Operator $\mathcal{O}$ übernommen werden. Die Abhängigkeit von Σ_T soll bestehen bleiben (das ist gerade der Trick!), um zu gewährleisten, daß der Operator $\mathcal{O}$ bei jedem Rekursionsschritt seine Form beibehält. Nach T Rekursionsschritten, sprich T-facher Anwendung von $\mathcal{O}$, hat man das Reservoir erreicht. Der Operator $\mathcal{O}$ findet sich also in der Rolle der Transfermatrix wieder; diese beschreibt ja die Wechselwirkungs-Konfigurationen auf einer Zeile und wandert zeilenweise durch das gesamte Gitter.
Bei näherer Betrachtung wird allerdings ersichtlich, daß (9) als Operatoridentität *nicht* erfüllt werden kann. Als Ausweg bietet sich an, (9) nicht als Operatoridentität aufzufassen, sondern stattdessen bei Anwendung auf einen speziellen Zustand zu erfüllen. Als spezieller Zustand $|0\rangle$ wird derjenige verwendet, in dem alle Spins (in einer Zeile) nach unten zeigen:

$$\rho_T(\Sigma_T)\;|0\rangle \;=\; \mathcal{O}\,\rho_{T-1}(\Sigma_T)\;|0\rangle\,. \tag{10}$$

Die Zustandssumme läßt sich dennoch bereits aus dieser schwächeren Formulierung der Rekursion gewinnen. Durch weiterführende Argumente wird in [1] gezeigt, daß unter gewissen Annahmen lediglich der Zustand $|0\rangle$ Beiträge zu einer Spur liefert. Durch geeignete Wahl des noch offengebliebenen ρ_0 (Reservoir) erhält man dann

$$Z \;=\; \mathrm{Sp}\left(\mathcal{O}^T\right) \tag{11}$$

bei periodischen Randbedingungen für die Spins in beiden Raumrichtungen. In (11) wird die schon erwähnte Rolle von $\mathcal{O}$ als Transfer-Operator ersichtlich.
Die notgedrungene Einführung des Zustands $|0\rangle$ stellt somit keine unüberwindbaren Hindernisse in den Weg; sie muß aber dennoch erwähnt werden, da sie bei

der Suche nach dem konkreten Aussehen von $\mathcal{O}$ ihre Spuren hinterläßt: Anstatt der bisherigen Spinoperatoren σ_m^x treten, da u.a. die Wirkung auf den Zustand $|0\rangle$ interessiert, neue Spinoperatoren auf,

$$\sigma_m^+ \quad : \quad \text{Spinheber}\,, \tag{12}$$

$$\sigma_m^- \quad : \quad \text{Spinsenker}\,, \tag{13}$$

die die Spins heben und senken (es wird kein Zeilenindex mehr benötigt, da $\mathcal{O}$ ja nach Herleitung für jede Zeile dieselbe Form aufweist).
Man findet

$$\mathcal{O} \;=\; [2\sinh(2\beta)]^{\frac{L}{2}} \cdot V \;=\; [2\sinh(2\beta)]^{\frac{L}{2}} \cdot V_3\, V_2\, V_1 \tag{14}$$

sowie für die Anteile V_1, V_2 und V_3:

$$V_1 \;=\; \exp\left[-2\tilde{\beta}\sum_{m=1}^{L}\left(\sigma_m^+\,\sigma_m^- - \frac{1}{2}\right)\right]\,, \tag{15}$$

$$V_2 \;=\; \exp\left[\beta\sum_{m=1}^{L}\left(\sigma_m^+ + \sigma_m^-\right)\left(\sigma_{m+1}^+ + \sigma_{m+1}^-\right)\right] \tag{16}$$

$$\begin{aligned} &= \exp\left[\beta\left\{\sum_{m=1}^{L-1}\left(\sigma_m^+ + \sigma_m^-\right)\left(\sigma_{m+1}^+ + \sigma_{m+1}^-\right)\right.\right. \\ &\qquad\left.\left. +\;\left(\sigma_L^+ + \sigma_L^-\right)\left(\sigma_1^+ + \sigma_1^-\right)\right\}\right]\,, \end{aligned} \tag{17}$$

$$V_3 \;=\; \exp\left[\beta B\sum_{m=1}^{L}\left(\sigma_m^+ + \sigma_m^-\right)\right]\,. \tag{18}$$

Wie bei den Wechselwirkungstermen (1)-(4), kann auch hier nach unterschiedlichen physikalischen Mechanismen unterschieden werden: V_1 beschreibt die Kopplung der Spins in vertikaler (t-) Richtung, V_2 diejenige in horizontaler (x-) Richtung. In (17) ist der in (16) durch die periodischen Spin-Randbedingungen enthaltene Randterm ausgeschrieben. Er wird uns später noch beschäftigen. Die Ankopplung an das externe Magnetfeld wird durch V_3 repräsentiert.
Die Aufspaltung $V = V_3\, V_2\, V_1$ wird ebenfalls in der Onsager-Kaufman-Lösung vorgenommen, so daß sich V_1, V_2 und V_3 aus beiden Lösungen einander identifizieren lassen.
Anders ausgedrückt: Schultz, Mattis und Lieb formulieren die aus der Onsager-Kaufman-Lösung bekannte Transfermatrix $V = V_3\, V_2\, V_1$ alternativ über Spinoperatoren, die die Spins heben und senken.

2.2 Transformation auf Fermion-Operatoren

Die Eigenschaften der Spinheber σ_m^+ und Spinsenker σ_m^- sollen näher untersucht werden. Operationen an Spins auf unterschiedlichen Gitterplätzen sind offensichtlich unabhängig voneinander; dies führt uns auf die Kommutatorrelation

$$[\,\sigma_m^\pm\,,\,\sigma_n^\pm\,] = 0 \qquad \text{für} \quad m \neq n\,. \tag{19}$$

Für Spinoperatoren, die auf denselben Gitterplätzen ihre Wirkung entfalten, gelten allerdings andere Relationen. Wie man sich durch Nachrechnen überzeugen kann, handelt es sich um die Antikommutatorrelationen

$$\{\sigma_m^+\,,\ \sigma_m^-\} = 1\,, \qquad \left(\sigma_m^+\right)^2 = \left(\sigma_m^-\right)^2 = 0\,. \tag{20}$$

Vergleicht man die Eigenschaften (19) und (20) mit den (Anti-) Kommutatorrelationen, die man aus der zweiten Quantisierung im Operatorformalismus kennt, so wird deutlich, daß *Spinheber und -Senker teils bosonischen und teils fermionischen Charakters* sind:

$$[\,\sigma_m^\pm\,,\ \sigma_n^\pm\,] = 0 \qquad \text{für} \quad m \neq n\ : \qquad \text{bosonisch} \tag{21}$$

$$\{\sigma_m^+\,,\ \sigma_m^-\} = 1\,, \qquad \left(\sigma_m^+\right)^2 = \left(\sigma_m^-\right)^2 = 0\ : \qquad \text{fermionisch} \tag{22}$$

Da die Invarianz dieser gemischten Relationen bei Transformationen schnell verletzt wird, erscheint eine Diagonalisierung schwer durchführbar. Den Ausweg bietet eine Transformation auf neue Operatoren C_m, $C_m^\dagger$:

$$C_m \;=\; \exp\left[\pi i \sum_{j=1}^{m-1} \sigma_j^+\,\sigma_j^-\right]\sigma_m^-\,, \tag{23}$$

$$C_m^\dagger \;=\; \exp\left[\pi i \sum_{j=1}^{m-1} \sigma_j^+\,\sigma_j^-\right]\sigma_m^+\,. \tag{24}$$

Bei C_m und $C_m^\dagger$ handelt es sich dann um *rein fermionische Operatoren*, die dem kompletten Satz an Antikommutatorregeln

$$\{C_i\,,\ C_j^\dagger\} = \delta_{ij}\,, \qquad \{C_i\,,\ C_j\} = \{C_i^\dagger\,,\ C_j^\dagger\} = 0 \tag{25}$$

gehorchen, wie man durch Nachrechnen zeigen kann.
Die Transformation (23), (24) geht zurück auf Jordan und Wigner und taucht bereits in ihrem Klassiker über die zweite Quantisierung von Fermionfeldern aus dem Jahre 1928 auf [15]. Schultz, Mattis und Lieb verwenden diese Transformation des Häufigeren [16, 17, 18].
Aus den Transformationsregeln (23) und (24) folgt:

$$\sigma_m^+\,\sigma_m^- \;=\; C_m^\dagger\,C_m\,;$$

$$\left.\begin{aligned} \sigma_m^+\,\sigma_{m+1}^+ &= C_m^\dagger\,C_{m+1}^\dagger\,, & \sigma_m^-\,\sigma_{m+1}^- &= -\,C_m\,C_{m+1}\,,\\ \sigma_m^+\,\sigma_{m+1}^- &= C_m^\dagger\,C_{m+1}\,, & \sigma_m^-\,\sigma_{m+1}^+ &= -\,C_m\,C_{m+1}^\dagger \end{aligned}\right\}\ \text{für}\ \ m < L\,;$$

$$\begin{aligned} \sigma_L^+\,\sigma_1^+ &= -\,(-1)^N\,C_L^\dagger\,C_1^\dagger\,, & \sigma_L^-\,\sigma_1^- &= (-1)^N\,C_L\,C_1\,,\\ \sigma_L^+\,\sigma_1^- &= -\,(-1)^N\,C_L^\dagger\,C_1\,, & \sigma_L^-\,\sigma_1^+ &= (-1)^N\,C_L\,C_1^\dagger\,. \end{aligned}$$

Bilinearformen von Spinhebern und -Senkern auf denselben und benachbarten Gitterplätzen bleiben also bilinear in den Fermionoperatoren. Für die in (16)

enthaltenen Randterme, die durch die periodischen Spinrandbedingungen hervorgerufen werden, gilt dies ebenfalls. Damit lassen sich V_1 und V_2 auf Fermionoperatoren transformieren, wobei der Randterm in V_2 dann eine von den anderen Termen abweichende Form aufweist.
Andere Kombinationen von Spinoperatoren überstehen diese Transformation allerdings nicht bzw. in keiner weiter verwertbaren Gestalt. Dies gilt insbesondere für V_3. An dieser Stelle muß die Lösung deshalb auf ein verschwindendes äußeres Magnetfeld ($B = 0 \to V_3 = 1$) eingeschränkt werden. Darüber hinaus muß man sich auf nächste-Nachbar-Wechselwirkungen beschränken; eine Erweiterung auf drei Dimensionen führt zu weiteren nächsten Nachbarn in einer zusätzlichen Raumrichtung, die ebenfalls derartige Probleme verursachen.

Gemäß den gefundenen Transformationsregeln lauten V_1 und V_2:

$$V_1 = \exp\left[-2\tilde{\beta}\sum_{m=1}^{L}\left(C_m^\dagger C_m - \frac{1}{2}\right)\right], \tag{26}$$

$$\begin{aligned} V_2 = \exp\Bigg[\beta\Bigg\{ & \sum_{m=1}^{L-1}\left(C_m^\dagger - C_m\right)\left(C_{m+1}^\dagger + C_{m+1}\right) \\ & - (-1)^N \left(C_L^\dagger - C_L\right)\left(C_1^\dagger + C_1\right)\Bigg\}\Bigg]. \end{aligned} \tag{27}$$

Hierbei ist

$$N = \sum_{m=1}^{L} C_m^\dagger C_m$$

der Teilchenzahloperator, der die Anzahl vorhandener Fermionen angibt.
An dieser Stelle sei ausdrücklich betont, daß weiterhin die Zustandssumme für Ising-Spins hergeleitet wird; die Fermion-Operatoren werden zu deren algebraischen Beschreibung verwendet.
Man beachte den Randterm in V_2 (27). Der nun folgende Abschnitt beschäftigt sich mit dessen Auswirkungen.

2.3 Aufteilung von V in V^+ und V^-

Der Randterm in V_2 (27) enthält den Ausdruck $(-1)^N$, wobei N der Fermionzähler ist. Offensichtlich kann diese Größe nur die Werte $+1$ und -1 annehmen:

$$(-1)^N = \begin{cases} +1 & \text{für} \quad \textit{gerade} \text{ Fermionzahl}, \\ -1 & \text{für} \quad \textit{ungerade} \text{ Fermionzahl}. \end{cases} \tag{28}$$

$(-1)^N$ ist somit ein Paritäts- bzw. Symmetrie - Operator, der nach Zuständen mit gerader Fermionzahl (symmetrisch) und ungerader Fermionzahl (antisymmetrisch) unterscheidet.
Da es sich bei $(-1)^N$ zudem um eine Erhaltungsgröße handelt, ist es sinnvoll, den Raum $\mathcal{H}$ der Eigenzustände in $\mathcal{H}_+$ und $\mathcal{H}_-$ zu unterteilen:

$\mathcal{H}_+$: Raum der Zustände mit *gerader* Fermionzahl

$\mathcal{H}_-$: Raum der Zustände mit *ungerader* Fermionzahl

Über eben diese Aufteilung gelingt es, den Randterm in V_2 weiter auszuwerten. Hierzu wird V_2 (und damit auch V) nach Zugehörigkeit zu $\mathcal{H}_+$ und $\mathcal{H}_-$ folgendermaßen in V_2^+ und V_2^- aufgespalten:

$$\begin{aligned}
\text{zu } \mathcal{H}_+ : \qquad V_2^+ \;&=\; \exp\Bigg[\beta\Bigg\{\sum_{m=1}^{L-1}\left(C_m^\dagger - C_m\right)\left(C_{m+1}^\dagger + C_{m+1}\right) \\
&\qquad - \left(C_L^\dagger - C_L\right)\left(C_1^\dagger + C_1\right)\Bigg\}\Bigg]; \qquad (29)
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\text{zu } \mathcal{H}_- : \qquad V_2^- \;&=\; \exp\Bigg[\beta\Bigg\{\sum_{m=1}^{L-1}\left(C_m^\dagger - C_m\right)\left(C_{m+1}^\dagger + C_{m+1}\right) \\
&\qquad + \left(C_L^\dagger - C_L\right)\left(C_1^\dagger + C_1\right)\Bigg\}\Bigg]. \qquad (30)
\end{aligned}$$

Damit wird $V = V_2\, V_1$ in V^+ und V^- geteilt.

Für die Zustandssumme erhält man somit:

$$Z' \;=\; \mathrm{Sp}\left[V^T\right] \;=\; \mathrm{Sp}_{\mathcal{H}_+}\left[(V^+)^T\right] \;+\; \mathrm{Sp}_{\mathcal{H}_-}\left[(V^-)^T\right]. \qquad (31)$$

Diese getrennte Spurbildung über V^+ und V^- tritt ebenfalls auf in der Onsager-Kaufman-Lösung aufgrund eines (anders gearteten) Randterms, der ebenfalls einen Symmetrieoperator enthält. Die Identifizierung von V^+ und V^- aus beiden Lösungen wird später offensichtlich werden, wobei die eben erfolgten Aufteilungen in dieser Lösung einfacher erscheinen.
Eine große Vereinfachung und Veranschaulichung gegenüber Onsager und Kaufman besteht in dem nun folgenden Schritt. Hierzu werden zunächst die in den Randtermen von V_2^+ (29) und V_2^- (30) übriggebliebenen Vorzeichen auf Randbedingungen für die Fermionoperatoren umgeschrieben:

$$\begin{aligned}
V_2^+ \;&=\; \exp\left[\beta\sum_{m=1}^{L}\left(C_m^\dagger - C_m\right)\left(C_{m+1}^\dagger + C_{m+1}\right)\right] \\
&\quad \text{mit} \quad C_{L+1} = -\,C_1 \quad \text{und} \quad C_{L+1}^\dagger = -\,C_1^\dagger\,; \qquad (32) \\
&\quad \text{antiperiodische RB}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
V_2^- \;&=\; \exp\left[\beta\sum_{m=1}^{L}\left(C_m^\dagger - C_m\right)\left(C_{m+1}^\dagger + C_{m+1}\right)\right] \\
&\quad \text{mit} \quad C_{L+1} = +\,C_1 \quad \text{und} \quad C_{L+1}^\dagger = +\,C_1^\dagger\,. \qquad (33) \\
&\quad \text{periodische RB}
\end{aligned}$$

Über eine diskrete Fouriertransformation werden nun (Fermion-) Impulse p_k eingeführt und die vorhandenen Größen in deren Abhängigkeit formuliert. Nun ist aber bereits aus der elementaren Statistik [19] bekannt, daß periodische bzw. antiperiodische Randbedingungen zu einer Diskretisierung der Impulse in der folgenden Form führen (man denke hierzu an einfache Wellenfunktionen):

V^+ : antiperiodische RB für Fermionen

$$\Longrightarrow \quad p_k = \frac{\pi}{L}, \frac{3\pi}{L}, \frac{5\pi}{L}, \ldots, \frac{(2L-1)\pi}{L}; \tag{34}$$

$$p_k = \frac{\pi k}{L} \quad \text{mit } k \text{ ungerade}, \quad k = 1, 3, 5, \ldots, 2L-1; \tag{35}$$

V^- : periodische RB für Fermionen

$$\Longrightarrow \quad p_k = 0, \frac{2\pi}{L}, \frac{4\pi}{L}, \ldots, \frac{(2L-2)\pi}{L}; \tag{36}$$

$$p_k = \frac{\pi k}{L} \quad \text{mit } k \text{ gerade}, \quad k = 0, 2, 4, \ldots, 2L-2. \tag{37}$$

Da sich die bisherige Indizierung der Operatoren auf die lokalisierten Gitterpunkte in einem Gitter endlicher Größe bzw. in einer Gitterzeile der Länge L bezog, ist die Fouriertransformation von diskreter Art (endlicher Wertesatz); dementsprechend erhält man in (34)-(37) auch nur endlich viele, nämlich jeweils L Impulswerte. Im Limes $L \to \infty$ hingegen liegt ein Gitter unendlicher Größe vor, und wie an (34)-(37) abzulesen ist, erhält man dann unendlich viele sowie kontinuierliche Impulswerte.
Dieses Ergebnis erhalten ebenfalls Onsager und Kaufman, allerdings als rein algebraische Bedingung während der Diagonalisierungsprozedur.

2.4 Diagonalisierung

Es verbleibt noch die eigentliche Diagonalisierung von V^+ und V^-. Die Prozedur selber ist komplizierterer und längerer Art und wird hier deshalb nicht vorgeführt. Das Resultat nach erfolgter Diagonalisierung ist jedoch von bestechend einfacher Form:

$$V = \exp\left[-\sum_k \varepsilon_k \left(\xi_k^\dagger \xi_k - \frac{1}{2}\right)\right]. \tag{38}$$

Durch die Auswahl ungerader k (35) bzw. gerader k (37) erhält man aus (38) V^+ bzw. V^-. Durch die Fouriertransformation des vorigen Abschnitts tritt nun k aus den Impulswerten als Index auf.
$\xi_k^\dagger$ und ξ_k sind neue, umtransformierte Fermion-Erzeuger bzw. -Vernichter, die

sich nun ebenfalls auf die Impulse beziehen.
Der Fermionzahloperator lautet damit

$$N \;=\; \sum_k \xi_k^\dagger \xi_k \;=\; \sum_k n_k \,, \tag{39}$$

wobei n_k aufgrund der Fermi-Statistik nur die Werte 0 und 1 annehmen kann:

$$n_k \;\in\; \{0,1\} \tag{40}$$

(Die Anzahl vorhandener Fermionen ändert sich bei der Fouriertransformation selbstverständlich nicht; man vergleiche hierzu die im vorigen Abschnitt vorgenommene Abzählung der Wertesätze).
Die „Fermion-Energien“ ε_k ergeben sich aus folgender Beziehung:

$$\cosh(\varepsilon_k) \;=\; \cosh(2\beta)\cosh(2\tilde{\beta}) - \cos\left(\frac{\pi k}{L}\right) \tag{41}$$

(Auf die Vorzeichenwahl soll hier nicht eingegangen werden; sie wird derart vorgenommen, daß die Ergebnisse in der folgenden Form gültig sind).

Die Eigenwerte von V^+ und V^- lassen sich nun besonders einfach und direkt an (38) ablesen. Bezeichnet man die Eigenwerte von V^+ mit λ_i^+, so erhält man mit (40):

$$\text{EW zu } V^+ : \qquad \lambda_i^+ \;=\; \exp\left[-\sum_{\substack{k \\ \text{ungerade}}} \varepsilon_k \left(n_k - \frac{1}{2}\right)\right]. \tag{42}$$

Ist kein Fermion mit Impuls k vorhanden, d.h. $n_k = 0$, so erhält der Summand $+\frac{1}{2}\varepsilon_k$ ein Pluszeichen. Bei einem vorhandenen Fermion hingegen, d.h. $n_k = 1$, taucht in dem jeweiligen Summanden $-\frac{1}{2}\varepsilon_k$ offensichtlich ein Minuszeichen auf.

$$\begin{array}{rrcl} n_k = 0: & \text{kein Fermion} & \Rightarrow & \text{Pluszeichen} \\ n_k = 1: & \text{Fermion} & \Rightarrow & \text{Minuszeichen} \end{array}$$

Damit ergeben sich aus (42) die Eigenwerte

$$\lambda_i^+ \;=\; \exp\left[\frac{1}{2}\left(\pm\varepsilon_1 \pm \varepsilon_3 \pm \varepsilon_5 \pm \ldots \pm \varepsilon_{2L-1}\right)\right], \tag{43}$$

wobei die Vorzeichen jeweils unabhängig zu wählen sind, da die n_k sämtlich unabhängig voneinander sind.

Für die Eigenwerte λ_i^- von V^- ergibt sich analog:

$$\text{EW zu } V^- : \qquad \lambda_i^- \;=\; \exp\left[-\sum_{\substack{k \\ \text{gerade}}} \varepsilon_k \left(n_k - \frac{1}{2}\right)\right] \tag{44}$$

$$\;=\; \exp\left[\frac{1}{2}\left(\pm\varepsilon_0 \pm \varepsilon_2 \pm \varepsilon_4 \pm \ldots \pm \varepsilon_{2L-2}\right)\right]. \tag{45}$$

Mit den nun bekannten Eigenwerten kann die Zustandssumme (31)

$$Z' \;=\; \mathrm{Sp}_{\mathcal{H}_+}\left[\left(V^+\right)^T\right] \;+\; \mathrm{Sp}_{\mathcal{H}_-}\left[\left(V^-\right)^T\right]$$

explizit ausgeschrieben werden; hierbei müssen allerdings die Restriktionen bezüglich $\mathcal{H}_+$ und $\mathcal{H}_-$ berücksichtigt werden. $\mathcal{H}_+$ verlangte die Beschränkung auf eine gerade Fermionzahl; für die Eigenwerte bedeutet dies nach obigen Überlegungen, daß von allen möglichen Vorzeichenkombinationen nur diejenigen erlaubt sind, die eine gerade Anzahl an Minuszeichen aufweisen. Bei $\mathcal{H}_-$ hingegen dürfen die Eigenwerte nur eine ungerade Anzahl an Minuszeichen vorweisen.
Insgesamt erhält man also:

$$\begin{aligned} & & (46) \\ Z' \;=\; & \sum_{\{gerade\, MZ\}} \exp\left[\frac{T}{2}\left(\pm\varepsilon_1 \pm \varepsilon_3 \pm \varepsilon_5 \pm \ldots \pm \varepsilon_{2L-1}\right)\right] & \\ & + \sum_{\{ungerade\, MZ\}} \exp\left[\frac{T}{2}\left(\pm\varepsilon_0 \pm \varepsilon_2 \pm \varepsilon_4 \pm \ldots \pm \varepsilon_{2L-2}\right)\right]. & (47) \end{aligned}$$

Dies entspricht dem Ergebnis von Onsager und Kaufman, wobei obige Kombinationen von geraden/ungeraden Impulsen und gerader/ungerader Anzahl an Minuszeichen bei ihnen auf rein algebraischen Ausdrücken beruhen. Insofern ist Schultz, Mattis und Lieb durch die fermionische Besetzungszahl-Darstellung eine deutliche Veranschaulichung dieser Ausdrücke gelungen.

Literatur

[1] T. D. Schultz, D. C. Mattis, E. H. Lieb,
„Two-Dimensional Ising Model as a Soluble Problem of Many Fermions“,
Rev. Mod. Phys. **36**, 856 (1964)

[2] W. Lenz, Phys. Zeitschrift **21**, 613 (1920)

[3] E. Ising, Zeitschrift f. Physik **31**, 253 (1925)

[4] W. Heisenberg, Zeitschrift f. Physik **49**, 619 (1928)

[5] R. Peierls,
„On Ising's Model of Ferromagnetism“,
Proc. Cambridge Phil. Soc. **32**, 477 (1936)

[6] H. A. Kramers and G. H. Wannier, Phys. Rev. **60**, 252 (1941)

[7] E. Montroll, J. Chem. Phys. **9**, 706 (1941); **10**, 61 (1942)

[8] R. Kubo, Busseiron Kenkyu **1**, 1 (1943),

[9] L. Onsager,
„Crystal Statistics I: A Two-Dimensional Model
with an Order-Disorder-Transition“
Phys. Rev. **65**, 117 (1944)

[10] B. Kaufman,
„Crystal Statistics II: Partition Function Evaluated by Spinor Analysis“
Phys. Rev. **76**, 1232 (1949)

[11] K. Huang, Statistische Mechanik III (BI-Verlag Mannheim,1964)

[12] K. Huang, Statistical Mechanics second edition (John Wiley & Sons,1987)

[13] C.N. Yang, Phys. Rev. **85**, 809 (1952)

[14] M. Kac, J. C. Ward, Phys. Rev. **88**, 1332 (1952)

[15] P. Jordan, E. Wigner, Z. Physik **47**, 631 (1928)

[16] T. Schultz, D. Mattis, E. Lieb,
„Two Soluble Models of an Antiferromagnetic Chain“
Ann. Phys. **16**, 407 (1961)

[17] E. Lieb, D. Mattis, Phys. Rev. **125**, 164 (1962)

[18] T. Schultz, J. Math. Phys. **4**, 666 (1963)

[19] W. Nolting, Grundkurs Theoretische Physik, Band 6: Statistische Physik