

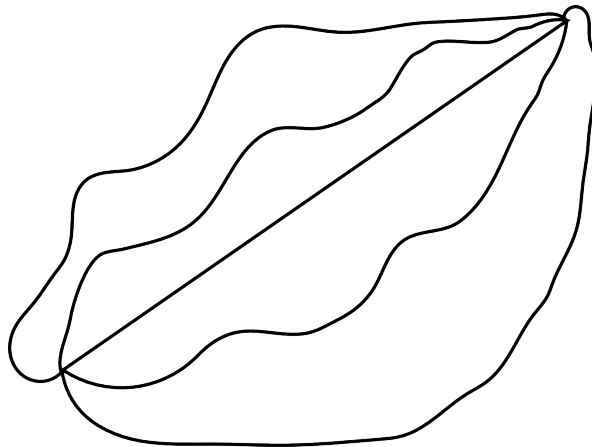
JOHANNES GUTENBERG-UNIVERSITÄT MAINZ

FACHBEREICH 08
INSTITUT FÜR PHYSIK

STUDIENGANG PHYSIK

BACHELORARBEIT

Pfadintegrale und ihre Anwendungen



von
Julian P. Großmann

Unter Betreuung von
Prof. Dr. P. G. J. van Dongen

Mainz, den 16. Mai 2011

Am 16. Dezember 2013 wurden kleine Verbesserungen vorgenommen und das Layout geändert.

Inhaltsverzeichnis

1. Einführung und Bezeichnungen	5
2. Feynmansches Pfadintegral	7
2.1. Notationen	7
2.2. Integralkern des Zeitentwicklungsoperators	7
2.3. Pfadintegral im Phasenraum	8
2.4. Pfadintegral im Konfigurationsraum	9
2.5. Pfadintegral für die Zustandssumme	10
3. Vielteilchenpfadintegral	11
3.1. System mehrerer Teilchen	11
3.2. Bosonen- und Fermionenräume	11
3.3. Fockräume	13
3.4. Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren	14
3.5. Kohärente Zustände	15
3.6. Operatoren und das Symbol	17
3.7. Pfadintegral durch kohärente Zustände	17
4. Spinpfadintegral	21
4.1. Spinoperatoren	21
4.2. Schwinger-Bosonen	22
4.3. Spinkohärente Zustände	22
4.4. Pfadintegral mit Schwinger-Bosonen	23
4.5. Zustandssummen im Spinraum	24
4.6. Pfadintegral für mehrere Spins	25
5. Heisenberg-Modell mit Pfadintegralen	27
5.1. Spin im Magnetfeld	27
5.2. Heisenberg-Modell in Molekularfeldnäherung	31
5.3. Heisenberg-Modell in unendlicher Dimensionalität	32
5.4. Ausblick	36
A. Anhang	37
A.1. Ort- und Impulsoperator	37
A.2. Verallgemeinerte Eigenvektoren	37
A.3. Orts- und Impulseigenvektoren	38
A.4. Trotter Produktformel	38
A.5. Tensorprodukt von Hilberträumen	39
A.6. Ein unendlich dimensionales Integral	40
A.7. Gaußintegral für normale Matrizen	40
A.8. Graßmann-Algebra	40

A.9. Erweiterter Fockraum	42
A.10. Unterraum der Schwinger-Bosonen	43
Literatur	44

1. Einführung und Bezeichnungen

Die herkömmliche Formulierung der Quantenmechanik mit Hilfe eines Hilbertraumes und linearen Operatoren ist sowohl physikalisch als auch mathematisch hochinteressant und äußerst fruchtbar, jedoch als Beschreibung der Naturgesetze von menschlicher Sichtweise durchaus unanschaulich. Diese fehlende Anschaulichkeit löste 1925, in den jungen Jahren der Quantenmechanik, ein gewisses Unbehagen aus, was vor allem Werner Heisenberg persönlich kränkte:¹ „Ich bin immer wütend, wenn ich die Theorie nur unter dem Namen Matrizenmechanik genannt höre.“

Dagegen wurde die sogenannte Wellenmechanik von Erwin Schrödinger, vor allem von ihm selbst, als anschauliche Beschreibung der Quantenphänomene angesehen. Aber auch diese ist nur von scheinbarer Natur, da die bekannten Wellenfunktionen keine Wellen im physikalischen Raum beschreiben, sondern nur im Konfigurationsraum existieren, welcher vor allem für Vielteilchensysteme hochdimensional ist. Schrödinger selbst zeigte die Äquivalenz der beiden Beschreibungen und damit auch gleichzeitig, dass die Anschauung in der Tat verloren geht, wenn man sich mit den kleinen Dingen der Natur befasst.

Von Richard Phillips Feynman stammt eine Umformulierung der Quantenmechanik, in der sogenannte *Pfadintegrale* die Rolle der Beschreibung von Zeitentwicklungen übernehmen. Ein Teilchen wählt nach Feynman nicht eine bestimmte Bahn von A nach B wie zum Beispiel die klassische Bewegungskurve aus, sondern vielmehr alle möglichen Bahnen, welche aber jeweils unterschiedlich berücksichtigt werden. Das Pfadintegral ist demnach eine Summe über all diese gewichteten Pfade und gibt die Wahrscheinlichkeitsamplitude für den Übergang von A nach B in einer gewissen Zeit an. Man kann diese Beschreibung als intuitiv und anschaulich bezeichnen, da nun alle Wege eine Rolle spielen und auch das Hamiltonsche Extremalprinzip als klassischer Grenzfall enthalten ist, jedoch ist die Verallgemeinerung auf Vielteilchensysteme, wie auch bei der Schrödingerschen Wellenmechanik, wieder weniger illustrativ. Gleichwohl ist die Möglichkeit Quantensysteme durch Integrale zu beschreiben vor allem im Hinblick auf störungstheoretische Rechnungen sehr vorteilhaft.

Diese Arbeit möchte den Pfadintegralformalismus darstellen und beginnt mit der Herleitung des Feynmanschen Pfadintegrals, welches Anwendungen für verschiedene Einteilchensysteme hat. Der Ableitung des Vielteilchenpfadintegrals geht ein kurzer Überblick über die Vielteilchenquantenmechanik voraus, da diese wesentlich gebraucht wird um eine elegante und nützliche Form des Pfadintegrals zu bekommen. Eine Umformulierung dieses bietet sich an, wenn man Systeme, in denen Spins eine Rolle spielen, beschreiben möchte. Dies geschieht durch das sogenannte Spinpfadintegral, welches allgemein hergeleitet wird. Eine direkte Anwendung dieses wird anhand des *Heisenberg-Modells* durchgeführt.

Eine mathematische Betrachtung des Pfadintegralformalismus ist interessant, jedoch würde diese in jeglicher Weise den Rahmen dieser Arbeit sprengen, sodass die

¹Brief von Heisenberg an Pauli, 16. November 1925, siehe [MEY].

Mathematik größtenteils im Anhang gepflegt wird. Auf eine komplette Wiederholung der mathematischen Struktur der Quantenmechanik wird verzichtet, jedoch werden manche unklare Objekte genau definiert. Dies ist nicht wesentlich für das Verständnis des Pfadintegralformalismus, aber in jedem Falle hilfreich.

Dagegen ist es notwendig die wichtigsten im Text verwendeten Symbole zu verstehen, die aus diesem Grund hier kurz aufgelistet sind:

Symbole

\hbar	Plancksche Konstante dividiert durch 2π
\mathbb{N}	Menge der natürlichen Zahlen $\{1, 2, \dots\}$
\mathbb{N}_0	$\mathbb{N} \cup \{0\}$
\mathbb{R}	Körper der reellen Zahlen
\mathbb{C}	Körper der komplexen Zahlen
$L^2(\mathbb{R}^d)$	Vektorraum der komplexwertigen quadratisch-integrierbaren Funktionen
\mathcal{H}	ein separabler komplexer Hilbertraum
$\langle \cdot \cdot \rangle$	Skalarprodukt in \mathcal{H} , linear im zweiten Argument
Δ	Laplace-Operator in \mathbb{R}^d
lin	lineare Hülle bzw. Spann einer Teilmenge eines Vektorraumes
ε_{ijk}	Levi-Civita Symbol
$[\cdot, \cdot]_-$	Kommutator von zwei Operatoren
$[\cdot, \cdot]_+$	Antikommutator von zwei Operatoren
$\widehat{\psi}$	Fouriertransformation von $\psi \in L^2$
δ_x	Diracsche Deltadistribution mit $\delta_x(f) = f(x)$ für Funktionen f
$\delta(x)$	Diracsche Deltafunktion als symbolische Schreibweise unter Integralen
ONB	Abkürzung für Orthonormalbasis
\equiv	Einführung einer neuen Definition
$S(N)$	Symmetrische Gruppe (Permutationen einer N -elementigen Menge)
\mathcal{F}	Fouriertransformation <i>oder</i> Fockraum
i	imaginäre Einheit
$\bar{\lambda}$	komplex konjugierte Zahl zu $\lambda \in \mathbb{C}$
$\mathbf{x} \cdot \mathbf{y}$	Abkürzung für $\sum_k x_k y_k$ bei endlichen und unendlichen Folgen
$\mathbb{1}$	Einheitsoperator im jeweiligen Vektorraum

2. Feynmansches Pfadintegral

Richard P. Feynman entwarf 1942 das Pfadintegral als alternative Grundlage der Quantenmechanik ausgehend von passenden Postulaten. Die Ausarbeitung ist interessant und illustrativ im Originalwerk [FEY] dargestellt. Unsere Vorgehensweise wird jedoch eine andere sein, da wir den Operatorformalismus inklusive den üblichen Axiomen der Quantenmechanik als bekannt voraussetzen und daraus den Pfadintegralformalismus herleiten.

2.1. Notationen

Zur Beschreibung der Quantenmechanik legen wir den komplexen separablen Hilbertraum der quadratisch Lebesgue-integrierbaren Funktionen $\mathcal{H} \equiv L^2(\mathbb{R}^d)$ zugrunde. Wir schreiben je nach Anlass $\psi = |\psi\rangle$ und $\psi_n = |\psi_n\rangle = |n\rangle$ für die Elemente aus \mathcal{H} .

Wir verwenden auch die üblichen Notationen der verallgemeinerten Eigenvektoren des Orts- und Impulsoperators und verweisen auf die exakten Definitionen im Anhang (A.2). Mit diesen können nun folgende Beziehung abgeleitet werden:

$$\mathbf{x}\psi = \psi(\mathbf{x}), \text{ und } \langle \mathbf{p} | \psi \rangle = \widehat{\psi}(\mathbf{p}), \quad (2.1)$$

$$\mathbb{1} = \int d\mathbf{x} |\mathbf{x}\rangle \langle \mathbf{x}| = \int d\mathbf{p} |\mathbf{p}\rangle \langle \mathbf{p}|. \quad (2.2)$$

Man kann nun für einen Operator A und $\psi, \phi \in \mathcal{H}$ entsprechend auch

$$\begin{aligned} \langle \psi | A | \phi \rangle &\equiv \langle \psi | A \phi \rangle = \int d\mathbf{x} \int d\mathbf{x}' \langle \psi | \mathbf{x} \rangle \langle \mathbf{x} | A | \mathbf{x}' \rangle \langle \mathbf{x}' | \phi \rangle \\ &= \int d\mathbf{x} \int d\mathbf{x}' \psi(\mathbf{x}) \langle \mathbf{x} | A | \mathbf{x}' \rangle \phi(\mathbf{x}') \end{aligned}$$

schreiben. Hierbei werden $\langle \mathbf{x} | A | \mathbf{x}' \rangle$ als Matrixelemente von A bezeichnet, wobei diese meistens rein symbolischer Natur sind, da sie nur unter einem Integral sinnvoll sind, es sei denn A ist ein Integraloperator, denn dann entspricht $\langle \mathbf{x} | A | \mathbf{x}' \rangle$ genau dem Integralkern von A , sodass wir für Integralkerne immer diese Notation wählen.

2.2. Integralkern des Zeitentwicklungsoperators

Betrachtet man die freie Schrödingergleichung in d Dimensionen, so interessiert man sich meistens für den Zeitentwicklungsoperator

$$U_t \equiv e^{-\frac{it}{\hbar} H_0}, \text{ mit } H_0 \equiv -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta, \quad (2.3)$$

welcher mit Hilfe der Fouriertransformation aus der Schrödingergleichung bestimmt werden kann und auch als Integraloperator ausgedrückt werden kann:

$$(U_t \psi)(\mathbf{x}) = \int d\mathbf{y} K_0(\mathbf{x}, \mathbf{y}, t) \psi(\mathbf{y}). \quad (2.4)$$

Dabei heißt K_0 der Integralkern des Zeitentwicklungsoperators, welcher durch

$$K_0(\mathbf{x}, \mathbf{y}, t) = \left(\frac{m}{2\pi\hbar it} \right)^{d/2} e^{\frac{im}{2\hbar t}(\mathbf{x}-\mathbf{y})^2} \equiv \langle \mathbf{x} | e^{-\frac{it}{\hbar}H_0} | \mathbf{y} \rangle \quad (2.5)$$

gegeben ist. Da der Zeitentwicklungsoperator nur von der Zeitdifferenz zwischen zwei Ereignissen abhängt, kann man $t = 0$ für den Startzeitpunkt setzen, was wir immer tun werden um die Formeln etwas übersichtlicher zu halten.

2.3. Pfadintegral im Phasenraum

Wir betrachten den Fall eines Hamiltonoperators, von welchem wir annehmen, dass er selbstadjungiert ist,

$$H = H_0 + V, \quad (2.6)$$

wobei der Potentialoperator V erst einmal nur von Ortsoperatoren abhängen soll. Dann ergibt sich der Zeitentwicklungsoperator mit Hilfe der Trotter Produktformel (A.6):

$$e^{-\frac{it}{\hbar}H} = \text{s-lim}_{M \rightarrow \infty} \left(e^{-\frac{it}{\hbar M}H_0} e^{-\frac{it}{\hbar M}V} \right)^M \quad (2.7)$$

Setzen wir nun $\varepsilon \equiv t/M$ und $K_\varepsilon \equiv e^{-\frac{i}{\hbar}\varepsilon H_0} e^{-\frac{i}{\hbar}\varepsilon V}$, so können wir den Integralkern schrittweise berechnen.

$$\begin{aligned} \langle \mathbf{x} | e^{-\frac{it}{\hbar}H} | \mathbf{y} \rangle &= \lim_{M \rightarrow \infty} \left\langle \mathbf{x} \left| \left(e^{-\frac{i}{\hbar}\varepsilon H_0} e^{-\frac{i}{\hbar}\varepsilon V} \right)^M \right| \mathbf{y} \right\rangle \\ &= \lim_{M \rightarrow \infty} \langle \mathbf{x} | K_\varepsilon \mathbb{1} K_\varepsilon \mathbb{1} \cdots \mathbb{1} K_\varepsilon | \mathbf{y} \rangle \\ &= \lim_{M \rightarrow \infty} \int d\mathbf{x}_1 \cdots d\mathbf{x}_{M-1} \langle \mathbf{x} | K_\varepsilon | \mathbf{x}_{M-1} \rangle \langle \mathbf{x}_{M-1} | K_\varepsilon | \mathbf{x}_{M-2} \rangle \cdots \langle \mathbf{x}_1 | K_\varepsilon | \mathbf{y} \rangle \\ &= \lim_{M \rightarrow \infty} \int \left[\prod_{l=1}^{M-1} d\mathbf{x}_l \right] \langle \mathbf{x} | K_\varepsilon | \mathbf{x}_{M-1} \rangle \langle \mathbf{x}_{M-1} | K_\varepsilon | \mathbf{x}_{M-2} \rangle \cdots \langle \mathbf{x}_1 | K_\varepsilon | \mathbf{y} \rangle \end{aligned} \quad (2.8)$$

Hier wurde wesentlich (2.2) ausgenutzt. Diese Vollständigkeitsrelation wird nun nochmals gebraucht, um die einzelnen Elemente zu bestimmen:

$$\begin{aligned} \langle \mathbf{x}_n | K_\varepsilon | \mathbf{x}_{n-1} \rangle &= \int d\mathbf{p}_n \langle \mathbf{x}_n | \mathbf{p}_n \rangle \langle \mathbf{p}_n | K_\varepsilon | \mathbf{x}_{n-1} \rangle \\ &= \int d\mathbf{p}_n \left(\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \right)^d e^{\frac{i}{\hbar}\mathbf{p}_n \cdot \mathbf{x}_n} e^{-\frac{i}{\hbar}\varepsilon H(\mathbf{p}_n, \mathbf{x}_{n-1})} \left(\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \right)^d e^{-\frac{i}{\hbar}\mathbf{p}_n \cdot \mathbf{x}_{n-1}}. \end{aligned}$$

Wir haben hier die klassische Hamiltonfunktion $H(\mathbf{p}, \mathbf{x}) \equiv H_0(\mathbf{p}) + V(\mathbf{x})$ eingeführt, in der $H_0(\mathbf{p})$ der verallgemeinerte Eigenwert von H_0 zum verallgemeinerten Impulseigenvektor ist. Entsprechend ist $V(\mathbf{x})$ Eigenwert von V zum Ortseigenvektor.

Mit diesem Ergebnis erhalten wir aus (2.8) und durch die Definitionen $\mathbf{x}_0 \equiv \mathbf{y}$ und $\mathbf{x}_M \equiv \mathbf{x}$ das Feynmansche *Pfadintegral im Phasenraum*:

$$\begin{aligned} \langle \mathbf{x} | e^{-\frac{it}{\hbar} H} | \mathbf{y} \rangle &= \lim_{M \rightarrow \infty} \int \left[\prod_{l=1}^{M-1} d\mathbf{x}_l \right] \left[\prod_{l=1}^M d\mathbf{p}_l \right] \left(\frac{1}{2\pi\hbar} \right)^{Md} \\ &\quad \cdot \exp \left(\frac{i}{\hbar} \sum_{k=1}^M [\mathbf{p}_k \cdot (\mathbf{x}_k - \mathbf{x}_{k-1}) - \varepsilon H(\mathbf{p}_k, \mathbf{x}_{k-1})] \right) \\ &= \lim_{M \rightarrow \infty} \int \left[\prod_{l=1}^{M-1} d\mathbf{x}_l \right] \left[\prod_{l=1}^M \frac{d\mathbf{p}_l}{(2\pi\hbar)^d} \right] e^{\frac{i}{\hbar} \sum_{k=1}^M \varepsilon [\mathbf{p}_k \cdot \frac{\mathbf{x}_k - \mathbf{x}_{k-1}}{\varepsilon} - H(\mathbf{p}_k, \mathbf{x}_{k-1})]} \\ &\equiv \int \mathcal{D}[\mathbf{x}] \mathcal{D}[\mathbf{p}] \exp \left[\frac{i}{\hbar} \int_0^t dt' (\mathbf{p} \cdot \dot{\mathbf{x}} - H) \right]. \end{aligned} \quad (2.9)$$

$$\equiv \int \mathcal{D}[\mathbf{x}] \mathcal{D}[\mathbf{p}] \exp \left[\frac{i}{\hbar} \int_0^t dt' (\mathbf{p} \cdot \dot{\mathbf{x}} - H) \right]. \quad (2.10)$$

Zu beachten ist, dass die letzte Gleichheit nur eine Definition des Grenzwertes ist. Man beschreibt diesen Ausdruck als *Kontinuumsdarstellung* des Pfadintegrals, auf dessen anschauliche Interpretation wir gleich eingehen werden.

2.4. Pfadintegral im Konfigurationsraum

Da im Hamiltonoperator der gewöhnliche freie Hamiltonian H_0 auftritt, kann man auch den bekannten Integrkern aus (2.5) benutzen um (2.8) direkt, d. h. ohne Einfügung der Impulseigenvektoren, zu berechnen. Das gleiche Ergebnis erhält man jedoch auch, wenn man in (2.9) die Integration nach den Impulsen ausführt. Die Berechnung des $d \cdot M$ -dimensionalen Gaußintegrals ergibt, nach der üblichen Formel (A.10),

$$\int \left[\prod_{l=1}^M \frac{d\mathbf{p}_l}{(2\pi\hbar)^d} \right] e^{\frac{i}{\hbar} \sum_{k=1}^M \varepsilon \left(\mathbf{p}_k \cdot \frac{\mathbf{x}_k - \mathbf{x}_{k-1}}{\varepsilon} - \frac{\mathbf{p}_k^2}{2m} \right)} = \left(\frac{2\pi\hbar m}{i\varepsilon} \right)^{dM/2} e^{\frac{i}{\hbar} \left(\frac{m}{2\varepsilon} (x_k - x_{k-1}) \right)}. \quad (2.11)$$

Damit erhält man das Feynmansche *Pfadintegral im Konfigurationsraum*:

$$\begin{aligned} \langle \mathbf{x} | e^{-\frac{it}{\hbar} H} | \mathbf{y} \rangle &= \\ &= \lim_{M \rightarrow \infty} \int \left[\prod_{l=1}^{M-1} d\mathbf{x}_l \right] \left(\frac{m}{2\pi\hbar i \varepsilon} \right)^{Md/2} e^{\frac{i}{\hbar} \sum_{k=1}^M \varepsilon \left(\frac{m}{2} \left(\frac{\mathbf{x}_k - \mathbf{x}_{k-1}}{\varepsilon} \right)^2 - V(\mathbf{x}_{k-1}) \right)} \\ &\equiv \int \mathcal{D}[\mathbf{x}] \exp \left[\frac{i}{\hbar} \int_0^t dt' \left(\frac{1}{2} m \dot{\mathbf{x}}^2 - V \right) \right] \equiv \int_{\mathbf{y} \xrightarrow[t]{} \mathbf{x}} \mathcal{D}[\mathbf{x}] e^{\frac{i}{\hbar} S} \end{aligned}$$

In dieser Notation bezeichnet S die klassische Wirkung und es wird über alle Bahnen des Teilchens von \mathbf{y} nach \mathbf{x} , welche die Zeit t benötigen, integriert. Dies ist in der Tat Feynmans ursprüngliche Formel, da hier nur noch über alle Pfade im Konfigurationsraum summiert wird. Zusätzlich liefert dies auch die anschauliche Interpretation, denn durch das Pfadintegral werden alle Möglichkeiten für das Teilchen, um vom Anfangs-

bis zum Endpunkt zu reisen, gewichtet mit einem Phasenfaktor, berücksichtigt. Im klassischen Limes $\hbar \rightarrow 0$ findet man das Hamiltonsche Extremalprinzip, da aufgrund des oszillierenden Phasenfaktors nur das Extremum beitragen kann. Dies ist auch als *Sattelpunktsentwicklung von Pfadintegralen* bekannt. Trotz des Auftretens des Symboles $\dot{\mathbf{x}}$ sollte man sich aber immer daran erinnern, dass die betrachteten Pfade im Allgemeinen weder differenzierbar noch stetig sind. Sie stellen lediglich eine symbolische Notation für die diskretisierten Pfade im Grenzwert $M \rightarrow \infty$ dar.

2.5. Pfadintegral für die Zustandssumme

Auch die kanonische Zustandssumme für ein einzelnes Teilchen kann durch ein Pfadintegral ausgedrückt werden. Man erhält dieses aus der Berechnung des Zeitentwicklungsoperators, wenn man die Zeit zu imaginären Werten analytisch fortsetzt. Die Zustandssumme ist bekanntermaßen durch

$$Z = \text{Spur} \left[e^{-\beta H} \right] \quad (2.12)$$

gegeben. Unter der Annahme, dass diese Spur existiert, ist sie über eine Integration des Integralkerns gegeben:

$$Z = \int d\mathbf{x} \langle \mathbf{x} | e^{-\beta H} | \mathbf{x} \rangle \quad (2.13)$$

Die Berechnung von $\langle \mathbf{x} | e^{-\beta H} | \mathbf{x} \rangle$ erfolgt für einen Hamiltonoperator $H = H_0 + V$ mit Hilfe der reellen Trotter Produktformel (A.7) analog zum Zeitentwicklungsoperator, sodass wir mit $\varepsilon = \frac{1}{M}\beta\hbar$ und $\mathbf{x}_0 = \mathbf{x}_M = \mathbf{x}$ das Ergebnis übernehmen können:

$$\begin{aligned} Z &= \int d\mathbf{x} \lim_{M \rightarrow \infty} \int \left[\prod_{l=1}^{M-1} d\mathbf{x}_l \right] \langle \mathbf{x} | e^{-\frac{\varepsilon}{\hbar} H_0} e^{-\frac{\varepsilon}{\hbar} V} | \mathbf{x}_{M-1} \rangle \cdot \\ &\quad \cdot \langle \mathbf{x}_{M-1} | e^{-\frac{\varepsilon}{\hbar} H_0} e^{-\frac{\varepsilon}{\hbar} V} | \mathbf{x}_{M-2} \rangle \cdots \langle \mathbf{x}_1 | e^{-\frac{\varepsilon}{\hbar} H_0} e^{-\frac{\varepsilon}{\hbar} V} | \mathbf{x} \rangle \\ &= \int d\mathbf{x} \lim_{M \rightarrow \infty} \int \left[\prod_{l=1}^{M-1} d\mathbf{x}_l \right] \langle \mathbf{x} | e^{-\frac{\varepsilon}{\hbar} H_0} | \mathbf{x}_{M-1} \rangle \cdots \\ &\quad \cdots \langle \mathbf{x}_1 | e^{-\frac{\varepsilon}{\hbar} H_0} | \mathbf{x} \rangle e^{-\frac{\varepsilon}{\hbar} \sum_{k=1}^M V(\mathbf{x}_{k-1})} \\ &= \int d\mathbf{x} \lim_{M \rightarrow \infty} \int \left[\prod_{l=1}^{M-1} d\mathbf{x}_l \right] \left(\frac{m}{2\pi\hbar\varepsilon} \right)^{dM/2} e^{-\frac{1}{\hbar} \sum_{k=1}^M \varepsilon \left(\frac{m}{2} \left(\frac{\mathbf{x}_k - \mathbf{x}_{k-1}}{\varepsilon} \right)^2 + V(\mathbf{x}_{k-1}) \right)} \\ &\equiv \int d\mathbf{x} \int \mathcal{D}[\mathbf{x}] \exp \left[-\frac{1}{\hbar} \int_0^{\beta\hbar} d\tau \left(\frac{1}{2} m \dot{\mathbf{x}}^2 + V \right) \right] \\ &\equiv \oint_{\beta\hbar} \mathcal{D}[\mathbf{x}] e^{-\frac{1}{\hbar} \tilde{S}}. \end{aligned}$$

In die Zustandssumme fließen demnach alle geschlossenen Bahnen mit Periode $\beta\hbar$. Hierbei steht \tilde{S} nicht für die klassische Wirkung, sondern für die zeitintegrierte Energie der betrachteten Bahn.

3. Vielteilchenpfadintegral

Wir werden erst die übliche Beschreibung der Vielteilchen-Quantenmechanik vorstellen und dann das Pfadintegral einführen. Wir benötigen dazu wieder einen komplexen separablen Hilbertraum \mathcal{H} , welchen wir nun nicht von vorne herein als $L^2(\mathbb{R}^d)$ festlegen, da in manchen Fällen auch endlich dimensionale Hilberträume ausreichen bzw. innere Freiheitsgrade durch $L^2 \otimes \mathbb{C}^n$ beschrieben werden.

3.1. System mehrerer Teilchen

Möchte man mehrere Teilchen beschreiben, bietet sich nun Ähnliches an wie bei der Berücksichtigung von inneren Freiheitsgraden. Für ein System von N Teilchen ist der zugrunde liegende Raum das N -fache Tensorprodukt des Einteilchenraumes:

$$\mathcal{H}_N \equiv \bigotimes_{k=1}^N \mathcal{H} = \mathcal{H} \otimes \mathcal{H} \otimes \cdots \otimes \mathcal{H} \quad (3.1)$$

Man verwendet üblicherweise die Definition $\mathcal{H}_0 \equiv \mathbb{C}$. Für ein Element aus \mathcal{H}_N führen wir folgende Schreibweisen ein:

$$\mathcal{H}_N \ni \psi_{\alpha_1} \otimes \cdots \otimes \psi_{\alpha_N} \equiv |\alpha_1\rangle \otimes \cdots \otimes |\alpha_N\rangle \equiv |\alpha_1 \cdots \alpha_N\rangle \quad (3.2)$$

Die Anzahl der Elemente in dieser Dirac-Notation bestimmt also auch den Raum H_N , aus welchem der Vektor stammt, so dass man diesen meistens nicht zusätzlich erwähnt. Die runde Klammer soll zur Unterscheidung der später eingeführten Elemente dienen. Ein bekannter Satz über Tensorprodukte von Hilberträumen rechtfertigt unser weiteres Vorgehen:

Satz Sei $(|\alpha\rangle)_{\alpha \in I}$ eine ONB in \mathcal{H} , dann ist $(|\alpha_1 \cdots \alpha_N\rangle)_{\alpha_1 \cdots \alpha_N \in I}$ eine ONB in \mathcal{H}_N , insbesondere gilt:

$$\sum_{\alpha_1 \cdots \alpha_N \in I} |\alpha_1 \cdots \alpha_N\rangle \langle \alpha_1 \cdots \alpha_N| = \mathbb{1}_{\mathcal{H}_N} \quad (3.3)$$

Demnach können wir mit dieser Notation alle Vektoren in \mathcal{H}_N beschreiben, sodass ab sofort $(|\alpha\rangle)_{\alpha \in I}$ eine festgewählte ONB in \mathcal{H} darstellt.

3.2. Bosonen- und Fermionenräume

Es zeigt sich nun, dass man zur Beschreibung der Vielteilchenquantenmechanik nicht den ganzen Raum \mathcal{H}_N benötigt, da nur symmetrische Wellenfunktionen (Bosonen) und antisymmetrische Wellenfunktionen (Fermionen) in der Natur auftreten. Dies ist eine direkte Folgerung aus der prinzipiellen Ununterscheidbarkeit von Teilchen und

dem Ausschließungsprinzip nach Pauli.¹ Aus diesem Grund reichen die genannten zwei Unterräume vollkommen aus und wir definieren die entsprechenden Projektionsoperatoren. Dabei bezeichnet $S(N)$ die symmetrische Gruppe der Menge $\{1, \dots, N\}$.

$$\mathcal{P}_+ |\alpha_1 \cdots \alpha_N\rangle = \frac{1}{N!} \sum_{\sigma \in S(N)} |\alpha_{\sigma(1)} \cdots \alpha_{\sigma(N)}\rangle \quad (3.4)$$

$$\mathcal{P}_- |\alpha_1 \cdots \alpha_N\rangle = \frac{1}{N!} \sum_{\sigma \in S(N)} (-1)^\sigma |\alpha_{\sigma(1)} \cdots \alpha_{\sigma(N)}\rangle \quad (3.5)$$

Der Faktor $(-1)^\sigma$ bezeichnet das Vorzeichen der Permutation σ . Üblicherweise möchte man beide Fälle durchgehend parallel behandeln, sodass es sich anbietet Bosonen und Fermionen zusammenzufassen. Wir schreiben deswegen

$$\zeta \equiv \begin{cases} -1 & \text{Fermionen} \\ +1 & \text{Bosonen} \end{cases} \quad (3.6)$$

und verwenden dies sowohl symbolisch im Sinne des Vorzeichens als auch in konkreten Berechnungen. Damit kann man selbsterklärend die zwei Projektionsoperatoren zu \mathcal{P}_ζ zusammenführen. Wichtig sind nun die entstehenden Unterräume, die wir für die weiteren Ausführungen folgendermaßen definieren:

$$\mathcal{H}_N^\zeta \equiv \mathcal{P}_\zeta \mathcal{H}_N . \quad (3.7)$$

Dies ist nun der Raum der symmetrischen bzw. antisymmetrischen N -Teilchen-Zustände. Für diese möchte man nun auch eine geeignete Orthonormalbasis wählen. Für die Konstruktion ist es hilfreich sogenannte Besetzungszahlen einzuführen, d. h. die Anzahl der Teilchen, die sich im selben Einteilchenzustand befinden.

Für einen Zustand $|\alpha_1 \cdots \alpha_N\rangle$ heißt

$$n_\beta \equiv \sum_{i=1}^N \delta_{\beta\alpha_i} \quad (3.8)$$

die *Besetzungszahl* des Zustandes $|\beta\rangle$. Aus ersichtlichen Gründen ergeben alle Besetzungszahlen für den gegebenen Zustand die Gesamtteilchenzahl:

$$\sum_{\alpha \in I} n_\alpha = N . \quad (3.9)$$

Mit dieser Definition ist es nun möglich die orthonormierten symmetrischen bzw. antisymmetrischen Zustände zu erklären:

$$|\alpha_1 \cdots \alpha_N\rangle \equiv |\alpha_1 \cdots \alpha_N\rangle_\zeta \equiv \sqrt{\frac{N!}{\prod_{\alpha \in I} n_\alpha!}} \mathcal{P}_\zeta |\alpha_1 \cdots \alpha_N\rangle . \quad (3.10)$$

¹Diese folgern wiederum aus dem Spin-Statistik-Theorem der Quantentheorie, welches 1940 von Wolfgang Pauli in *The Connection Between Spin and Statistics* theoretisch begründet wurde.

Die Unterscheidung zwischen Bosonen- und Fermionenzuständen wird, wenn möglich, unterdrückt, da es meistens aus dem Kontext heraus bekannt ist, um welche Teilchenart es sich handelt. Im Falle von Bosonen existiert sowieso eine noch kompaktere Schreibweise, da die Reihenfolge gleichbesetzter Zustände keine Rolle spielt. Man verwendet eine *Besetzungszahldarstellung* der folgenden Form:

$$|(n_\alpha)\rangle \equiv |(n_\alpha)_{\alpha \in I}\rangle \equiv |\alpha_1 \cdots \alpha_N\rangle_+ , \text{ mit } n_\beta \equiv \sum_{i=1}^N \delta_{\beta \alpha_i} . \quad (3.11)$$

Da eine meistens unendliche Folge im Ket steht, zeigt dies immer zweifellos an, dass es sich um die Besetzungszahlen handelt. Bei einer expliziten Angabe eines Zustandes in Besetzungszahlen muss aber auch immer klar angegeben werden, welche Stelle für welchen Zustand steht.

Wohlgermerkt können Besetzungszahlen für antisymmetrische Zustände nur die Werte 0 oder 1 annehmen und eine Besetzungszahldarstellung würde nicht die Reihenfolge, und damit ein Vorzeichen, berücksichtigen. Für Fermionen bietet sich also keine analoge Darstellung an.

3.3. Fockräume

Als Fockraum bezeichnet man allgemein den Raum, in dem alle Teilchenzahlen vorkommen dürfen. Dies wird mathematisch durch die direkte Summe aller N -Teilchen-Hilberträume erreicht:

$$\mathcal{F}(\mathcal{H}) \equiv \bigoplus_{N=0}^{\infty} \mathcal{H}_N \quad (3.12)$$

Ein Element des Fockraumes ist also eine Folge

$$\Psi \equiv (\psi_0, \psi_1, \cdots) \in \mathcal{H}_0 \times \mathcal{H}_1 \times \cdots , \quad (3.13)$$

für die $\sum_{N=0}^{\infty} \|\psi_N\|_N^2 < \infty$ gilt. Dabei bezeichnet $\|\cdot\|_N$ die gewöhnliche Norm in \mathcal{H}_N . Das Skalarprodukt des Fockraumes ist entsprechend als

$$\langle \Psi | \Psi' \rangle \equiv \sum_{N=0}^{\infty} \langle \psi_N | \psi'_N \rangle , \quad (3.14)$$

d. h. als Reihe der N -Teilchen Skalarprodukte, gegeben. Da wir jedoch oft endliche Folgen behandeln, ist folgende Schreibweise sinnvoller:

$$\mathcal{F}(\mathcal{H}) \ni (\psi_0, \psi_1, \cdots) \equiv \psi_0 \oplus \psi_1 \oplus \cdots \equiv \psi_0 + \psi_1 + \cdots \quad (3.15)$$

Meistens benutzt man die letztere Notation, in der eine Verwechslung mit der gewöhnlichen Vektorraumaddition in allen Fällen ausgeschlossen ist, sodass man zur weiteren Vereinfachung wieder die Bra-Ket-Schreibweise der N -Teilchen-Hilberträume verwenden kann.

Das einfachste normierte Element des Fockraumes, also $(1, 0, \cdots)$, nennen wir den *Vakuumzustand* und definieren diesen mit

$$|0\rangle \equiv 1 \in \mathcal{H}_0 . \quad (3.16)$$

Wohlgermerkt ist dies nicht der Nullvektor des Fockraumes, sondern in der Tat ein normiertes Element. In der oben erklärten Schreibweise wird der Nullvektor einfach durch die Zahl 0 dargestellt.

Wie vorhin beschrieben ist auch der gesamte Fockraum viel zu allgemein, sodass wir uns wieder auf die Unterräume der Bosonen oder Fermionen beschränken können:

$$\mathcal{F}_\zeta \equiv \bigoplus_{N=0}^{\infty} \mathcal{H}_N^\zeta. \quad (3.17)$$

Wir nennen \mathcal{F}_+ den *bosonischen Fockraum* und entsprechend \mathcal{F}_- den *fermionischen Fockraum*.

3.4. Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren

Wir führen den *Vernichtungsoperator* a_λ ein, welcher ein Teilchen im Zustand $|\lambda\rangle$ entfernt. Da die Teilchenanzahl somit nicht erhalten ist, ist die Beschreibung im Fockraum zwingend erforderlich, jedoch beschränken wir uns hier auf die Wirkung im symmetrischen bzw. antisymmetrischen Fockraum.²

Für Bosonen definieren wir

$$\begin{aligned} a_\lambda : \mathcal{F}_+ &\longrightarrow \mathcal{F}_+ \\ |(n_\alpha)\rangle &\longmapsto \sqrt{n_\lambda} |(n_\alpha - \delta_{\alpha\lambda})\rangle \end{aligned}$$

und entsprechend für Fermionen

$$\begin{aligned} a_\lambda : \mathcal{F}_- &\longrightarrow \mathcal{F}_- \\ |\alpha_1 \cdots \alpha_N\rangle &\longmapsto \begin{cases} (-1)^{i-1} |\alpha_1 \cdots \hat{\alpha}_i \cdots \alpha_N\rangle & , \text{ falls } |\alpha_i\rangle = |\lambda\rangle \\ 0 & , \text{ falls } |\lambda\rangle \text{ nicht besetzt} \end{cases} \end{aligned}$$

Hierbei bedeutet $\hat{\alpha}_i$, dass der i -te Einteilchenzustand entfernt wurde.

Die zu den Vernichtungsoperatoren adjungierten Operatoren nennen wir die *Erzeugungsoperatoren* a_λ^\dagger , welche ein Teilchen im Zustand $|\lambda\rangle$ erzeugen, und damit für Bosonen

$$a_\lambda^\dagger |(n_\alpha)\rangle = \sqrt{n_\lambda + 1} |(n_\alpha + \delta_{\alpha\lambda})\rangle \quad (3.18)$$

lauten. Für Fermionen ergibt sich wieder die einfache Darstellung, da jeder Zustand nur einfach besetzt werden kann.

$$a_\lambda^\dagger |\alpha_1 \cdots \alpha_N\rangle = \begin{cases} |\lambda \alpha_1 \cdots \alpha_N\rangle & , \text{ falls } |\alpha_i\rangle \neq |\lambda\rangle \ \forall i \in \{1 \cdots N\} \\ 0 & , \text{ falls } |\lambda\rangle \text{ schon besetzt} \end{cases} \quad (3.19)$$

Hier gelten nun die wichtigen Vertauschungsrelationen:

$$[a_\alpha, a_\beta]_{-\zeta} = [a_\alpha^\dagger, a_\beta^\dagger]_{-\zeta} = 0, \text{ und } [a_\alpha, a_\beta^\dagger]_{-\zeta} = \delta_{\alpha\beta}. \quad (3.20)$$

Mit Hilfe der Erzeugungsoperatoren kann jeder Vielteilchenzustand aus dem Vakuumzustand erzeugt werden, was wir im nächsten Abschnitt ausnutzen werden.

²Man kann die Vernichtungs- und Erzeugungsoperatoren auch im kompletten Fockraum einführen, sodass man auf die folgende Fallunterscheidung verzichtet.

3.5. Kohärente Zustände

Wie immer sei $(|\alpha\rangle)_{\alpha \in I}$ eine abzählbare ONB des ursprünglichen Einteilchenhilbertraums \mathcal{H} . Man nennt nun die Eigenzustände der Vernichtungsoperatoren a_α *kohärente Zustände*. Diese existieren in der Tat, da im Fockraum auch Elemente enthalten sind, die alle Teilchenanzahlen repräsentieren. Dagegen kann es zu den Erzeugungsoperatoren keinen Eigenzustand geben.

Bosonische kohärente Zustände

Sei $\phi \equiv (\phi_\alpha) \equiv (\phi_\alpha)_{\alpha \in I}$ eine Folge von komplexen Zahlen. Nun nennen wir $|\phi\rangle$ einen kohärenten Zustand, wenn die Eigenwertgleichung

$$a_\alpha |\phi\rangle = \phi_\alpha |\phi\rangle \quad (3.21)$$

für alle $\alpha \in I$ erfüllt ist. Die genaue Natur des Vektors in \mathcal{F}_+ wurde aber noch nicht gefasst und erfordert etwas Vorarbeit. Dazu definieren wir die komplexen Zahlen

$$\phi_{(n_\alpha)} \equiv \prod_{\alpha \in I} \frac{\phi_\alpha^{n_\alpha}}{\sqrt{n_\alpha!}} \quad (3.22)$$

und nutzen wieder aus, dass wir Fockzustände nicht als Folge sondern als unendliche Summe schreiben.

$$|\phi\rangle \equiv \sum_{(n_\alpha)} \phi_{(n_\alpha)} |(n_\alpha)\rangle \quad (3.23)$$

Es wird hier über alle Besetzungszahlen summiert, sodass der kohärente Zustand tatsächlich eine Überlagerung von beliebig vielen Teilchen darstellt. Dass die Eigenwertgleichung erfüllt ist, kann man nun leicht zeigen. Nun nutzen wir aus, dass wir jeden Zustand mit Erzeugungsoperatoren aus dem Vakuum $|0\rangle$ erzeugen können,

$$|(n_\alpha)\rangle = \prod_{\alpha \in I} \frac{(a_\alpha^\dagger)^{n_\alpha}}{\sqrt{n_\alpha!}} |0\rangle, \quad (3.24)$$

und schreiben den kohärenten Zustand kompakt als

$$|\phi\rangle = \sum_{(n_\alpha)} \prod_{\alpha \in I} \frac{(\phi_\alpha a_\alpha^\dagger)^{n_\alpha}}{n_\alpha!} |0\rangle = e^{\sum_\alpha \phi_\alpha a_\alpha^\dagger} |0\rangle \equiv e^{\phi \cdot \mathbf{a}^\dagger} |0\rangle, \quad (3.25)$$

wobei die unendliche Summe als Skalarprodukt abgekürzt wurde.

Eine andere alternative Formulierung der bosonischen kohärenten Zustände, welche sehr elegant aber auch etwas unanschaulicher ist, geschieht durch Betrachtung eines Vektors $\psi_\phi = \sum_{\alpha \in I} \phi_\alpha |\alpha\rangle$ des Hilbertraumes \mathcal{H} . Das n -fache Tensorprodukt $\psi_\phi^{\otimes n}$ liegt in \mathcal{H}_n und somit auch im Fockraum. Der kohärente Zustand ist nun durch

$$|\phi\rangle = \sum_{n \in \mathbb{N}} \frac{\psi_\phi^{\otimes n}}{\sqrt{n!}} \quad (3.26)$$

gegeben. Eine Basisbetrachtung von \mathcal{F}_+ zeigt die Gleichheit mit (3.23).

Verschiedene kohärente Zustände sind nicht orthonormiert, denn man erhält

$$\langle \phi | \phi' \rangle = \exp \left(\sum_{\alpha \in I} \bar{\phi}_\alpha \phi'_\alpha \right). \quad (3.27)$$

Dies sollte nicht überraschen, da die Menge der komplexen Zahlen überabzählbar ist und somit keine abzählbare ONB entstehen kann. Darüber hinaus erkennt man auch, dass die Vektoren nicht normiert sind, was man bei Berechnungen immer berücksichtigen muss.

Als besonders vorteilhaft erweist es sich den Einheitsoperator des Fockraumes in kohärenten Zuständen auszudrücken:

$$\mathbb{1} = \int \left[\prod_{\alpha \in I} \frac{d\bar{\phi}_\alpha d\phi_\alpha}{2\pi i} \right] e^{-\bar{\phi} \cdot \phi} |\phi\rangle \langle \phi|. \quad (3.28)$$

Zur richtigen Interpretation dieses Ausdruckes sollte gesagt werden, dass das Integral für abzählbar unendliches I wie das reelle unendlich dimensionale Gaußintegral in (A.12) zu verstehen ist, also als Grenzwert von endlich vielen Integrationen, und dass die Integration über komplexe Variablen auf Real- und Imaginärteil gemäß

$$d\bar{z}dz \equiv \overline{d(x+iy)} \wedge d(x+iy) = 2idx \wedge dy \quad (3.29)$$

zurückgeführt werden kann.

Fermionische kohärente Zustände

Im Fockraum der Fermionen existieren keine kohärenten Zustände im Sinne der oben genannten Definition, da die Besetzungszahlen nur zwei Werte annehmen können. Jedoch kann man mit Hilfe von Graßmann-Variablen einen erweiterten Fockraum definieren (s. Anhang), sodass in diesem tatsächlich, analog zum bosonischen Fall, Eigenvektoren zu den Vernichtungsoperatoren existieren. Nun sei $\boldsymbol{\eta} \equiv (\eta_\alpha) \equiv (\eta_\alpha)_{\alpha \in I}$ eine Folge von Graßmann-Variablen, dann definiert

$$|\boldsymbol{\eta}\rangle \equiv e^{-\boldsymbol{\eta} \cdot \mathbf{a}^\dagger} |0\rangle = \prod_{\alpha \in I} (1 - \eta_\alpha a_\alpha^\dagger) |0\rangle \quad (3.30)$$

einen fermionischen kohärenten Zustand. Eine analoge Vollständigkeitsrelation kann man nach Definition der Integration von Graßmann-Variablen durch

$$\mathbb{1} = \int \left[\prod_{\alpha \in I} d\bar{\eta}_\alpha d\eta_\alpha \right] e^{-\bar{\boldsymbol{\eta}} \cdot \boldsymbol{\eta}} |\boldsymbol{\eta}\rangle \langle \boldsymbol{\eta}| \quad (3.31)$$

ausdrücken, wobei so die Identität des erweiterten Fockraumes dargestellt wird.

3.6. Operatoren und das Symbol

Die in Vielteilchensystemen auftretenden allgemeinen Operatoren können durch die eingeführten Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren ausgedrückt werden, was gemeinläufig als *Zweite Quantisierung* bezeichnet wird, was jedoch eine unpassende Bezeichnung für diese einfache Umformulierung ist. Besonders vorteilhaft wird die Darstellung später im Pfadintegral werden.

Betrachten wir einen allgemeinen Operator A , welcher mit einer Funktion f aus Vernichtern und Erzeugern zusammengesetzt ist, d. h. $A = f(\mathbf{a}^\dagger, \mathbf{a})$. Das *Symbol* von A ist dann

$$\sigma_A(\phi, \phi') \equiv f(\bar{\phi}, \phi'). \quad (3.32)$$

Es entsteht formal durch Ersetzen der Operatoren mit komplexen Zahlen. Da keine Verwechslungsgefahr besteht und man die Notation vereinfachen möchte, verwendet man sowohl für den Operator als auch für das Symbol die gleiche Schreibweise, ohne explizite Erwähnung einer Funktion f , d. h.

$$A \equiv A(\mathbf{a}^\dagger, \mathbf{a}) \text{ und } A(\phi, \phi') \equiv \sigma_A(\phi, \phi'). \quad (3.33)$$

Bei dieser Schreibweise ist nur zu beachten, dass das erste Argument des Symbols komplex konjugiert wird.

3.7. Pfadintegral durch kohärente Zustände

Das Feynmansche Pfadintegral wurde mit Hilfe der verallgemeinerten Impuls- und Ortseigenvektoren hergeleitet. Für ein Vielteilchensystem bietet es sich an das Pfadintegral mit kohärenten Zuständen aufzubauen. Wir behandeln den fermionischen und bosonischen Fall nochmals gemeinsam, indem ϕ je nach Teilchenart eine Folge von komplexen Zahlen oder Grassmann-Variablen darstellt. Im Falle der letzteren sind alle Rechnungen im erweiterten Fockraum zu verstehen. Wir setzen nun

$$\mathbb{1} = \int \left[\prod_{\alpha \in I} \frac{d\bar{\phi}_\alpha^k d\phi_\alpha^k}{\mathcal{N}} \right] e^{-\bar{\phi}^k \cdot \phi^k} |\phi^k\rangle \langle \phi^k|, \text{ mit } \mathcal{N} \equiv \begin{cases} 1 & \text{Fermionen} \\ 2\pi i & \text{Bosonen} \end{cases}, \quad (3.34)$$

zur Herleitung an. Hierbei steht k für einen zusätzlichen Index und sollte nicht mit einer Potenz verwechselt werden.

Der Hamiltonoperator H des Systems besteht nun aus den Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren und sei normalgeordnet,

$$H = H(\mathbf{a}^\dagger, \mathbf{a}) = :H(\mathbf{a}^\dagger, \mathbf{a}):, \quad (3.35)$$

d. h. alle Vernichtungsoperatoren stehen rechts der Erzeugungsoperatoren. Der einschließende Doppelpunkt steht immer für diese Normalordnung. Entscheidend bei der Herleitung wird die Abschätzung³

$$e^{-i\varepsilon H} = 1 - i\varepsilon H + \mathcal{O}(\varepsilon^2 H^2) = 1 - i\varepsilon :H: + \mathcal{O}(\varepsilon^2 H^2) = :e^{-i\varepsilon H}: + \mathcal{O}(\varepsilon^2 H^2), \quad (3.36)$$

³Hier und in allen anderen Abschnitten steht $\mathcal{O}(\varepsilon^2 H^2)$ nicht im Sinne des üblichen Landau-Symbols, sondern als Abkürzung für eine Reihe der Form $\sum_{k=2}^{\infty} a_k (\varepsilon H)^k$.

sodass man im Grenzwert $\varepsilon \rightarrow 0$ den normalgeordneten Exponentialoperator zur Verfügung hat.

Wir setzen nun wieder $\varepsilon \equiv t/M$ und $\phi^f \equiv \phi^M$ und berechnen:

$$\begin{aligned} \langle \phi^f | e^{-\frac{it}{\hbar}H} | \phi^0 \rangle &= \langle \phi^f | \left(e^{-\frac{i\varepsilon}{\hbar}H} \right)^M | \phi^0 \rangle \\ &= \langle \phi^f | e^{-\frac{i\varepsilon}{\hbar}H} \mathbb{1} e^{-\frac{i\varepsilon}{\hbar}H} \dots \mathbb{1} e^{-\frac{i\varepsilon}{\hbar}H} | \phi^0 \rangle \\ &= \int \left[\prod_{k=1}^{M-1} \prod_{\alpha \in I} \frac{d\bar{\phi}_\alpha^k d\phi_\alpha^k}{\mathcal{N}} \right] \langle \phi^f | :e^{-\frac{i\varepsilon}{\hbar}H}: + \mathcal{O}(\varepsilon^2 H^2) | \phi^{M-1} \rangle \dots \\ &\quad \dots \langle \phi^1 | :e^{-\frac{i\varepsilon}{\hbar}H}: + \mathcal{O}(\varepsilon^2 H^2) | \phi^0 \rangle e^{-\sum_{k=1}^{M-1} \bar{\phi}^k \cdot \phi^k} . \end{aligned}$$

Nun nutzen wir aus, dass für das Matricelement eines normalgeordneten Operators $A(\mathbf{a}^\dagger, \mathbf{a})$ in kohärenten Zuständen

$$\langle \phi^k | A | \phi^l \rangle = A(\phi^k, \phi^l) \langle \phi^k | \phi^l \rangle = A(\phi^k, \phi^l) \cdot e^{\bar{\phi}^k \cdot \phi^l} \quad (3.37)$$

gilt. Dabei bezeichnet $A(\phi^k, \phi^l)$ das Symbol des Operators A .

Somit erhalten wir:

$$\begin{aligned} \langle \phi^f | e^{-\frac{it}{\hbar}H} | \phi^0 \rangle &= \langle \phi^f | \left(e^{-\frac{i\varepsilon}{\hbar}H} \right)^M | \phi^0 \rangle \\ &= \lim_{M \rightarrow \infty} \int \left[\prod_{l=1}^{M-1} \prod_{\alpha \in I} \frac{d\bar{\phi}_\alpha^l d\phi_\alpha^l}{\mathcal{N}} \right] e^{-\sum_{k=1}^{M-1} \bar{\phi}^k \cdot \phi^k} \\ &\quad \cdot \exp \left(\sum_{k=1}^M \bar{\phi}^k \cdot \phi^{k-1} - \frac{i\varepsilon}{\hbar} H(\phi^k, \phi^{k-1}) \right) \\ &= \lim_{M \rightarrow \infty} \int \left[\prod_{l=1}^{M-1} \prod_{\alpha \in I} \frac{d\bar{\phi}_\alpha^l d\phi_\alpha^l}{\mathcal{N}} \right] e^{\bar{\phi}^M \cdot \phi^{M-1}} \\ &\quad \cdot \exp \left[i\varepsilon \left(\sum_{k=1}^{M-1} \left(i\bar{\phi}^k \cdot \frac{\phi^k - \phi^{k-1}}{\varepsilon} \right) + \sum_{k=1}^M \left(-\frac{1}{\hbar} H(\phi^k, \phi^{k-1}) \right) \right) \right] \\ &\equiv \int \mathcal{D}[\phi] e^{\bar{\phi}^f \cdot \phi^f} \exp \left[\frac{i}{\hbar} \int_0^t dt' \left(i\hbar \overline{\phi(t')} \cdot \frac{\partial \phi(t')}{\partial t'} - H(\phi(t'), \phi(t')) \right) \right] \\ &\equiv \int_{\phi^f \xrightarrow[t]{} \phi^0} \mathcal{D}[\phi] e^{\bar{\phi}^f \cdot \phi^f} e^{\frac{i}{\hbar} S} . \end{aligned}$$

Man erkennt, dass man für den Zeitentwicklungsoperator ein zum Feynmanschen Pfadintegral analoges Ergebnis gewinnt. Somit lässt sich auch die Zustandssumme in kohärenten Vektoren ausdrücken. Zu beachten ist jedoch, dass für Fermionen antiperiodische Randbedingungen gelten, d. h. die Spur beinhaltet ein zusätzliches

ζ . Da kohärente Zustände alle Teilchenanzahlen beinhalten, möchte man oft die großkanonische Zustandssumme berechnen, was im Fall $A = H - \mu N$ zu erreichen ist. Mit den gleichen Definitionen wie zuvor ($\varepsilon = \beta\hbar/M$) gilt nun:

$$\begin{aligned}
Z &= \text{Spur} \left[e^{-\beta A} \right] = \int \left[\prod_{\alpha \in I} \frac{d\bar{\phi}_\alpha d\phi_\alpha}{\mathcal{N}} \right] e^{-\bar{\phi} \cdot \phi} \langle \zeta \phi | e^{-\beta A} | \phi \rangle \\
&= \int \left[\prod_{k=1}^M \prod_{\alpha} \frac{d\bar{\phi}_\alpha^k d\phi_\alpha^k}{\mathcal{N}} \right] \langle \phi^M | :e^{-\frac{\varepsilon}{\hbar} H} : + \mathcal{O}(\varepsilon^2 A^2) | \phi^{M-1} \rangle \dots \\
&\quad \dots \langle \phi^1 | :e^{-\frac{\varepsilon}{\hbar} H} : + \mathcal{O}(\varepsilon^2 A^2) | \phi^0 \rangle e^{-\sum_{k=1}^M \bar{\phi}^k \cdot \phi^k} \\
&\hspace{15em} \text{mit } \phi^0 \equiv \phi, \phi^M \equiv \zeta \phi \\
&= \lim_{M \rightarrow \infty} \int \left[\prod_{k=1}^M \prod_{\alpha \in I} \frac{d\bar{\phi}_\alpha^k d\phi_\alpha^k}{\mathcal{N}} \right] \\
&\quad \exp \left[-\varepsilon \left(\sum_{k=1}^M \left(\bar{\phi}^k \cdot \frac{\phi^k - \phi^{k-1}}{\varepsilon} \right) + \sum_{k=1}^M \frac{1}{\hbar} A(\phi^k, \phi^{k-1}) \right) \right] \\
&\equiv \int \mathcal{D}[\phi] \exp \left[-\frac{1}{\hbar} \int_0^{\beta\hbar} d\tau \left(\bar{\hbar} \phi(\tau) \cdot \frac{\partial \phi(\tau)}{\partial \tau} - H(\phi(\tau), \phi(\tau)) \right) \right] \\
&\equiv \oint_{\beta\hbar} \mathcal{D}[\phi] e^{-\frac{1}{\hbar} \tilde{S}}.
\end{aligned}$$

Oft wird die eingeführte imaginäre Zeit τ durch die Transformation $\tau \rightarrow \hbar\tau$ umgewandelt, damit \hbar aus der Formel herausfällt:

$$Z = \int \mathcal{D}[\phi] \exp \left[-\int_0^\beta d\tau \left(\bar{\phi}(\tau) \cdot \frac{\partial \phi(\tau)}{\partial \tau} - H(\phi(\tau), \phi(\tau)) \right) \right]. \quad (3.38)$$

Diese Darstellung der Zustandssumme dient oft als Ausgangspunkt für störungstheoretische Rechnungen und auch wir werden sie gegen Ende bei der Betrachtung des Heisenberg-Modells verwenden.

4. Spinpfadintegral

Wie zu Beginn des letzten Abschnitts erwähnt, ändert sich die Darstellung der Einzelteilchenquantenmechanik, wenn man innere Freiheitsgrade wie Spins berücksichtigt. Beschreibt man nun ausschließlich Spins und deren Wechselwirkungen, was wir später im Heisenberg-Modell tun werden, so kann man dies auch mit Methoden der Vielteilchenphysik behandeln. Wir werden kurz die Eigenschaften der Spinoperatoren wiederholen und dann mit Hilfe von sogenannten *spinkohärenten Zuständen* ein Pfadintegral herleiten.

4.1. Spinoperatoren

Der Vektorraum zur Beschreibung von Spinzuständen ist endlich dimensional, sodass wir ihn mit \mathbb{C}^n wählen können. Dies ist auch die übliche Beschreibung des Spins, die wir hier kurz zusammenstellen möchten.

Wir betrachten Teilchen mit einem halbzahligen oder ganzzahligen Spin s im Raum \mathbb{C}^{2s+1} und halten für die weiteren Rechnungen folgende Abkürzung fest

$$\mathbb{M}_s \equiv \{-s, -s + 1, \dots, s - 1, s\} . \quad (4.1)$$

Eine ONB von \mathbb{C}^{2s+1} wird fest gewählt und als

$$(|s, m\rangle)_{m \in \mathbb{M}_s} \quad (4.2)$$

notiert. Es existieren drei Operatoren, S_x , S_y und S_z , welche durch die nachfolgenden Gleichungen festgesetzt sind. Wir schreiben $\mathbf{S}^2 \equiv S_x^2 + S_y^2 + S_z^2$ und nennen diesen, sowie S_x , S_y und S_z , die *Spinoperatoren*. Für diese gilt nun:

$$S_z |s, m\rangle = m |s, m\rangle \quad (4.3)$$

$$\mathbf{S}^2 |s, m\rangle = s(s + 1) |s, m\rangle \quad (4.4)$$

$$[S_k, S_l]_- = i\varepsilon_{klm} S_m , \text{ wobei } k, l, m \in \{x, y, z\} , \text{ mit Summenkonvention.} \quad (4.5)$$

Man definiert nun die bekannten Auf- und Absteigeoperatoren für den Spin,

$$S_{\pm} \equiv S_x \pm iS_y , \quad (4.6)$$

und zeigt leicht, dass der Zusammenhang

$$S_z S_{\pm} = S_{\pm} (S_z \pm \mathbb{1}) \quad (4.7)$$

gilt, welcher die Benennung rechtfertigt. Diese werden im folgenden Abschnitt von zentraler Bedeutung sein, weswegen wir die Darstellung weiter vereinfachen möchten.

4.2. Schwinger-Bosonen

Die Spinalgebra kann man nun auch durch den bekannten Vielteilchenformalismus ausdrücken, indem man einen $2s + 1$ -dimensionalen Unterraum des bosonischen Fockraumes nimmt, dort zwei Einteilchenzustände wählt und mit Hilfe der üblichen Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren die Spinoperatoren festlegt. Die mathematische Konstruktion des besagten Fockraumes ist im Anhang dargestellt. Wichtig ist jedoch nur, dass zwei verschiedene Erzeugungsoperatoren a^\dagger und b^\dagger und die entsprechenden Vernichtungsoperatoren verwendet werden.

$$S^+ = a^\dagger b \quad (4.8)$$

$$S^- = b^\dagger a \quad (4.9)$$

$$S_z = \frac{1}{2} (a^\dagger a - b^\dagger b) . \quad (4.10)$$

Der gesamte Fockraum ist bekanntermaßen abzählbar unendlich dimensional und eine ONB des bosonischen Fockraumes ist zum Beispiel durch $\{|n_a, n_b\rangle \mid n_a, n_b \in \mathbb{N}_0\}$ in Besetzungszahlen gegeben, welche man nach

$$\mathbf{S}^2 = S_x^2 + S_y^2 + S_z^2 = \frac{a^\dagger a + b^\dagger b}{2} \left(\frac{a^\dagger a + b^\dagger b}{2} + 1 \right) \quad (4.11)$$

einschränken muss, damit auch die Eigenschaft (4.4) gilt. Der nun wichtige Unterraum ist demnach

$$U_s \equiv \text{lin} \{ |n_a, n_b\rangle \mid n_a + n_b = 2s \} , \quad (4.12)$$

mit einem gewählten Projektionsoperator, welchen man mit den Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren zum Beispiel als

$$P_s \equiv \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} d\lambda e^{i\lambda(a^\dagger a + b^\dagger b - 2s)} \quad (4.13)$$

darstellen kann. Die entsprechenden Eigenvektoren zu S_z und \mathbf{S}^2 sind durch passend gewählte Besetzungszahlen festgelegt. Wir schreiben deswegen

$$|m\rangle_s \equiv |s + m, s - m\rangle = \frac{(a^\dagger)^{s+m}}{\sqrt{(s+m)!}} \frac{(b^\dagger)^{s-m}}{\sqrt{(s-m)!}} |0\rangle \quad (4.14)$$

für $m \in \mathbb{M}_s$. $|0\rangle$ bezeichnet hier wie immer den Vakuumzustand des Fockraumes. Diese Vektoren bilden, analog zu den Zuständen (4.2), eine ONB für den Unterraum U_s .

4.3. Spinkohärente Zustände

Mit Hilfe der Schwinger-Bosonen lassen sich, so wie aus der Vielteilchenquantenmechanik bekannt, kohärente Zustände definieren. Diese sind für $\phi = (\phi_1, \phi_2) \in \mathbb{C}^2$ durch

$$|\phi\rangle = e^{\phi \cdot \mathbf{a}^\dagger} |0\rangle , \text{ mit } \mathbf{a}^\dagger \equiv (a^\dagger, b^\dagger) \quad (4.15)$$

gegeben. Diese liegen jedoch nicht in U_s , was man aber durch eine Projektion leicht erreichen kann:

$$|\phi_s\rangle \equiv P_s |\phi\rangle = \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} d\lambda e^{-i2s\lambda} |e^{i\lambda}\phi\rangle. \quad (4.16)$$

Dass diese Gleichung gilt, kann man mit Hilfe einer kurzen Rechnung zeigen:

$$\begin{aligned} e^{i\lambda(\mathbf{a}^\dagger \cdot \mathbf{a})} |\phi\rangle &= e^{i\lambda(\mathbf{a}^\dagger \cdot \mathbf{a})} e^{\phi \cdot \mathbf{a}^\dagger} |0\rangle = \sum_{n=0}^{\infty} e^{i\lambda(\mathbf{a}^\dagger \cdot \mathbf{a})} \frac{(\phi \cdot \mathbf{a}^\dagger)^n}{n!} |0\rangle \\ &= \sum_{n=0}^{\infty} e^{i\lambda n} \frac{(\phi \cdot \mathbf{a}^\dagger)^n}{n!} |0\rangle = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \left(e^{i\lambda} \phi \cdot \mathbf{a}^\dagger \right)^n |0\rangle = e^{(e^{i\lambda}\phi) \cdot \mathbf{a}^\dagger} |0\rangle \\ &= |e^{i\lambda}\phi\rangle. \end{aligned}$$

Aufgrund der Darstellung (4.16) können wir viele bekannte Rechnungen der kohärenten Zustände auch für den endlich dimensionalen Unterraum übernehmen. Die projizierten kohärenten Vektoren nennen wir die *spinkohärenten Zustände*, wobei zu beachten ist, dass diese keine Eigenvektoren der Vernichtungsoperatoren mehr sein können. Jedoch ist es mit diesen nun auch möglich ein Pfadintegral zu konstruieren.

4.4. Pfadintegral mit Schwinger-Bosonen

Beachten wir die Eigenschaften

$$\langle \phi_s | \phi'_s \rangle = \langle \phi | P_s^2 | \phi' \rangle = \langle \phi | P_s | \phi' \rangle \quad (4.17)$$

und

$$\text{Spur}(P_s A P_s) = \text{Spur}(A P_s), \quad (4.18)$$

so erkennt man, dass man alle Rechnungen für das Vielteilchenpfadintegral übernehmen kann, wenn man nur einen zusätzlichen Projektor einfügt. Das Skalarprodukt von spinkohärenten Zuständen ist zum Beispiel:

$$\begin{aligned} \langle \phi_s | \phi'_s \rangle &= \langle \phi | P_s^2 | \phi' \rangle = \langle \phi | P_s | \phi' \rangle = \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} d\lambda e^{-i2s\lambda} (\langle \phi | \phi' \rangle)^{e^{i\lambda}} \\ &= \frac{1}{2\pi i} \oint_{|z|=1} dz e^z \frac{1}{z^{2s+1}} a^z, \text{ mit } \langle \phi | \phi' \rangle \equiv a \\ &= \text{Res}_0 \left[\frac{e^{z(1+\ln a)}}{z^{2s+1}} \right] \\ &= \frac{1}{(2s)!} (1 + \ln a)^{2s} = \frac{1}{(2s)!} (1 + \bar{\phi}_1 \phi'_1 + \bar{\phi}_2 \phi'_2)^{2s}. \end{aligned}$$

Ein Pfadintegral bietet sich nun an, um die Zustandssumme für ein System, dessen Hamiltonoperator nur aus Spinoperatoren besteht, zu berechnen. Aber auch andere Observablen können wichtig sein, sodass wir allgemein einen Operator A , welcher

auch aus Schwinger-Bosonen besteht, betrachten und wie immer $\beta > 0$ setzen. Dann ergibt sich die partielle Spur $_{U_s}$ im Unterraum mit Hilfe der Spur im gesamten Fockraum durch

$$\text{Spur}_{U_s} [A] = \sum_{m \in \mathbb{M}_s} {}_s \langle m | A | m \rangle_s = \sum_{n_a, n_b} \langle n_a, n_b | AP_s | n_a, n_b \rangle = \text{Spur} [AP_s] . \quad (4.19)$$

Nun ergibt sich:

$$\begin{aligned} \text{Spur} \left[e^{-\beta A} P_s \right] &= \int \left[\prod_{\alpha=1}^2 \frac{d\bar{\phi}_\alpha d\phi_\alpha}{2\pi i} \right] e^{-\bar{\phi} \cdot \phi} \langle \phi | e^{-\beta A} P_s | \phi \rangle \\ &= \int \left[\prod_{k=1}^M \prod_{\alpha=1}^2 \frac{d\bar{\phi}_\alpha^k d\phi_\alpha^k}{2\pi i} \right] \langle \phi^0 | :e^{-\frac{\varepsilon}{\hbar} A} : + \mathcal{O}(\varepsilon^2 A^2) | \phi^{M-1} \rangle \dots \\ &\quad \dots \langle \phi^1 | \left(:e^{-\frac{\varepsilon}{\hbar} A} : + \mathcal{O}(\varepsilon^2 A^2) \right) P_s | \phi^0 \rangle e^{-\sum_{k=1}^M \bar{\phi}^k \cdot \phi^k} . \end{aligned}$$

Dies geschieht wie üblich durch $(M - 1)$ -maliges Einfügen der Identität des Fockraumes, mit den Notationen $\varepsilon \equiv \beta\hbar/M$ und $\phi^0 \equiv \phi^M \equiv \phi$. Bis auf das letzte Matrixelement unterscheidet sich dies nicht vom bekannten Pfadintegral, sodass wir erhalten:

$$\begin{aligned} \text{Spur} \left[e^{-\beta A} P_s \right] &= \lim_{M \rightarrow \infty} \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} d\lambda e^{-2i\lambda s} \int \left[\prod_{k=1}^M \prod_{\alpha=1}^2 \frac{d\bar{\phi}_\alpha^k d\phi_\alpha^k}{2\pi i} \right] e^{-\sum_{k=1}^M \bar{\phi}^k \cdot \phi^k} \\ &\quad \cdot \prod_{k=1}^M \exp \left[e^{i\delta_{1k}\lambda} \bar{\phi}^k \cdot \phi^{k-1} - \frac{\varepsilon}{\hbar} A(\phi^k, e^{i\delta_{1k}\lambda} \phi^{k-1}) \right] . \end{aligned} \quad (4.20)$$

Wohlgemerkt ist hier das Kronecker-Delta nur für die zusammenfassende Form erforderlich und der Punkt steht wie immer für das Skalarprodukt. Eine Anwendung dieses Spinpfadintegrals wird im nächsten Abschnitt anhand des Heisenberg-Modells geschehen.

4.5. Zustandssummen im Spinraum

Aus der statistischen Physik ist bekannt, dass die die großkanonische Zustandssumme $Z(\mu)$ durch den Hamiltonoperator des Systems und ein chemisches Potential μ gegeben ist:

$$Z(\mu) = \text{Spur} \left[e^{-\beta(H - \mu N)} \right] , \quad \text{mit } N \equiv a^\dagger a + b^\dagger b \quad (4.21)$$

Dabei kann die Teilchenzahl jeden beliebigen Wert annehmen, welche in unserer Betrachtung gerade $2s$ entspricht, d. h.

$$\begin{aligned}
Z(\mu) &= \sum_{n_a, n_b} \langle n_a, n_b | e^{-\beta(H-\mu N)} | n_a, n_b \rangle \\
&= \sum_{2s=0}^{\infty} \left(e^{\beta\mu} \right)^{2s} \sum_{m \in \mathbb{M}_s} \langle m | e^{-\beta H} | m \rangle_s \\
&= \sum_{2s=0}^{\infty} \gamma^{2s} Z_s \\
&\equiv Z(\gamma) \quad , \quad \text{mit } \gamma \equiv e^{\beta\mu} \quad , \quad \text{und } Z_s \equiv \text{Spur} \left[e^{-\beta H} P_s \right] . \quad (4.22)
\end{aligned}$$

Dabei stellt Z_s die gewöhnliche kanonische Zustandssumme, im jeweiligen Unterraum gebildet, dar. Diese wollen wir im nächsten Abschnitt für das Heisenberg-Modell auch berechnen. Es wird sich jedoch als nützlich herausstellen den Faktor γ^{2s} bei der Berechnung mitzuführen und den Weg über die großkanonische Zustandssumme zu gehen.

Entscheidend ist noch folgende allgemeine Eigenschaft für das chemische Potential von Bosonen zu erwähnen:

$$\mu < \min \left\{ \langle (n_\alpha) | H | (n_\alpha) \rangle \mid \exists \beta \forall \alpha \in I : n_\alpha = \delta_{\beta\alpha} \right\} \equiv \varepsilon_{min} . \quad (4.23)$$

In Worten ist das chemische Potential demnach immer echt kleiner als das niedrigste Einteilchenenergieniveau.

4.6. Pfadintegral für mehrere Spins

In diesem Abschnitt möchten wir das Spinpfadintegral im Hinblick auf das Heisenberg-Modell entwickeln. Da man es in diesem mit N Spins zu tun hat, führen wir für jeden einzelnen Gitterplatz Schwinger-Bosonen (a_i, b_i) ein. Es muss nun auch jeweils die entsprechende Einschränkung auf den Unterraum gelten, d. h.

$$a_i^\dagger a_i + b_i^\dagger b_i = 2s \quad \forall i, \quad \mathbf{a} \equiv (a_1, b_1, a_2, b_2, \dots, b_N) , \quad \mathbf{a}_i \equiv (a_i, b_i) , \quad (4.24)$$

welche wiederum durch entsprechende orthogonale Projektoren

$$P_{s,i} \equiv \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} d\lambda e^{i\lambda(a_i^\dagger a_i + b_i^\dagger b_i - 2s)} \quad (4.25)$$

repräsentiert wird. Der für uns wichtige Unterraum wird also durch den Gesamtprojektor

$$Q_s \equiv \prod_i P_{s,i} \quad (4.26)$$

abgebildet. Es ist jetzt aber zu beachten, dass die von uns genannten spinkohärenten Zustände nun folgende Gestalt annehmen:

$$Q_s |\phi\rangle = \left| \left(e^{i\lambda_1} \phi_1, e^{i\lambda_2} \phi_2, \dots, e^{i\lambda_N} \phi_{2N-1}, e^{i\lambda_N} \phi_{2N} \right) \right\rangle \equiv |\Phi(\lambda)\rangle . \quad (4.27)$$

Nun kann analog zu vorhin die Spur, mit Hilfe von (4.19), für einen Operator A berechnet werden:

$$\text{Spur} \left[e^{-\beta A} Q_s \right] = \int \left[\prod_{\alpha=1}^{2N} \frac{d\bar{\phi}_\alpha d\phi_\alpha}{2\pi i} \right] e^{-\bar{\phi} \cdot \phi} \langle \phi | e^{-\beta A} Q_s | \phi \rangle . \quad (4.28)$$

Auch hier kommt man mit den üblichen Notationen und dem Einfügen der Identität zu einem Pfadintegral. Wie vorhin ist hier nur auf das letzte Matrix-Element zu achten, da alle anderen schon bekannt sind.

$$\begin{aligned} \text{Spur} \left[e^{-\beta A} Q_s \right] &= \\ &= \lim_{M \rightarrow \infty} \int_0^{2\pi} \left[\prod_{j=1}^N \frac{d\lambda_j}{2\pi} e^{-2i\lambda_j s} \right] \int \left[\prod_{k=1}^M \prod_{\alpha=1}^{2N} \frac{d\bar{\phi}_\alpha^k d\phi_\alpha^k}{2\pi i} \right] e^{-\sum_{k=1}^M \bar{\phi}^k \cdot \phi^k} \cdot \\ &\quad \cdot \prod_{k=2}^M \exp \left[\bar{\phi}^k \cdot \phi^{k-1} - \frac{\varepsilon}{\hbar} A(\phi^k, \phi^{k-1}) \right] \cdot \\ &\quad \cdot \exp \left[\bar{\phi}^1 \cdot \Phi^0(\lambda) - \frac{\varepsilon}{\hbar} A(\phi^1, \Phi^0(\lambda)) \right] . \end{aligned} \quad (4.29)$$

Es bietet sich hier keine einfache übersichtliche Schreibweise an, sodass wir die Notation $\Phi(\lambda)$ bestehen lassen. Anhand des Heisenberg-Modells wird im nächsten Abschnitt sowohl eine Anwendung des einfachen Spinpfadintegrals sowie des gerade beschriebenen Spinpfadintegrals für N Spins demonstriert.

5. Heisenberg-Modell mit Pfadintegralen

Das allgemeine Heisenberg-Modell lautet bekanntlich

$$H = \sum_{i,j} J_{ij} \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j - \mathbf{B} \cdot \sum_{i=1}^N \mathbf{S}_i, \quad (5.1)$$

wobei in den am häufigsten betrachteten Fällen die Kopplungskonstanten J_{ij} nur für nächste Nachbarn nicht verschwinden. Im einfachen Fall des hyperkubischen d -dimensionalen Gitters beträgt die Anzahl der nächsten Nachbarn für einen Spin $z = 2d$. \mathbf{B} ist ein äußeres homogenes Magnetfeld, welches auf jeden der N Spins wirkt. Da wir nun im Folgenden das Verhalten im Grenzwert unendlicher Dimension erläutern möchten, wählen wir das vereinfachte isotrope Heisenberg-Modell und skalieren die Kopplungskonstanten entsprechend:

$$H = -\frac{J}{2d} \sum_{\langle i,j \rangle} \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j - \mathbf{B} \cdot \sum_{i=1}^N \mathbf{S}_i \quad (5.2)$$

Hier und im weiteren Verlauf steht $\langle i, j \rangle$ für die Summierung über nächste Nachbarn. Das Modell (5.2) werden wir im Weiteren betrachten, jedoch zur Einführung den Pfadintegralformalismus in einem einfachen und wichtigen Beispiel erläutern. Dieses Ergebnis verwenden wir dann weiter für das oben genannte Heisenberg-Modell und werden am Ende den Grenzwert unendlich hoher Dimensionalität, ebenfalls mit Hilfe von Pfadintegralen, betrachten.

5.1. Spin im Magnetfeld

Befassen wir uns zu Beginn mit dem Fall eines Spins der Größe s in einem Magnetfeld \mathbf{B} , welches die z -Richtung definieren soll, so erhalten wir durch Einführung der Schwinger-Bosonen den Hamiltonoperator

$$H = -\mathbf{B} \cdot \mathbf{S} = -BS^z = -\frac{B}{2} (a^\dagger a - b^\dagger b) \equiv -r (a^\dagger a - b^\dagger b). \quad (5.3)$$

Die kohärenten Zustände sind für $\phi = (\phi_1, \phi_2) \in \mathbb{C}^2$ durch

$$|\phi\rangle = e^{\phi \cdot \mathbf{a}^\dagger} |0\rangle, \quad \text{mit } \mathbf{a}^\dagger \equiv (a^\dagger, b^\dagger) \quad (5.4)$$

gegeben und alle anderen Bezeichnungen aus dem vorherigen Abschnitt werden übernommen. Wir stellen nun fest, dass wir $\gamma^{2s} Z_s$ umschreiben können als

$$\gamma^{2s} Z_s = \text{Spur} \left[e^{-\beta(H - \mu \mathbf{a}^\dagger \cdot \mathbf{a})} P_s \right], \quad (5.5)$$

sodass wir darauf das Spinpfadintegral (4.20) anwenden können:

$$\begin{aligned} \gamma^{2s} Z_s &= \lim_{M \rightarrow \infty} \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} d\lambda e^{-2i\lambda s} \int \left[\prod_{k=1}^M \prod_{\alpha=1}^2 \frac{d\bar{\phi}_\alpha^k d\phi_\alpha^k}{2\pi i} \right] e^{-\sum_{k=1}^M \bar{\phi}^k \cdot \phi^k} \\ &\quad \cdot \prod_{k=1}^M \exp \left[e^{i\lambda \delta_{1k}} \left(\bar{\phi}^k \cdot \phi^{k-1} - \frac{\varepsilon}{\hbar} H(\phi^k, \phi^{k-1}) + \frac{\varepsilon}{\hbar} \mu \bar{\phi}^k \cdot \phi^{k-1} \right) \right]. \end{aligned}$$

Das Symbol des Hamiltonoperators ist nun gegeben durch

$$H(\phi^k, \phi^{k-1}) = -r \left(\bar{\phi}_1^k \phi_1^{k-1} - \phi_2^k \phi_2^{k-1} \right), \quad (5.6)$$

wodurch weitere Zusammenfassungen möglich sind. Es ergibt sich nun:

$$\begin{aligned} \gamma^{2s} Z_s &= \int \left[\prod_{\alpha=1}^2 \frac{d\bar{\phi}_\alpha d\phi_\alpha}{2\pi i} \right] e^{-\bar{\phi} \cdot \phi} \langle \phi^0 | e^{-\beta(H-\mu N)} P_S | \phi^0 \rangle \\ &= \lim_{M \rightarrow \infty} \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} d\lambda e^{-2i\lambda s} \int \left[\prod_{k=1}^M \prod_{\alpha} \frac{d\bar{\phi}_\alpha^k d\phi_\alpha^k}{2\pi i} \right] e^{-\sum_{k=1}^M \bar{\phi}^k \cdot \phi^k} \\ &\quad \cdot \prod_{k=1}^M \exp \left[e^{i\delta_{1k}\lambda} \left(\bar{\phi}_1^k \phi_1^{k-1} \left(1 + \frac{\varepsilon}{\hbar} (r + \mu) \right) + \bar{\phi}_2^k \phi_2^{k-1} \left(1 - \frac{\varepsilon}{\hbar} (r - \mu) \right) \right) \right] \\ &= \lim_{M \rightarrow \infty} \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} d\lambda e^{-2i\lambda s} \int \left[\prod_{k=1}^M \prod_{\alpha} \frac{d\bar{\phi}_\alpha^k d\phi_\alpha^k}{2\pi i} \right] \\ &\quad \cdot \exp \left[- \sum_{j,k=1}^M \bar{\phi}_1^j R_{jk}^+ \phi_1^k - \sum_{j,k=1}^M \bar{\phi}_2^j R_{jk}^- \phi_2^k \right]. \end{aligned}$$

Dabei ist

$$R^\pm = \begin{pmatrix} 1 & & & -\alpha e^{i\lambda} \\ -\alpha & 1 & & \\ & \ddots & \ddots & \\ & & -\alpha & 1 \end{pmatrix}, \quad \text{mit } \alpha = 1 + \frac{\beta}{M} (\mu \pm r). \quad (5.7)$$

Die Dimension der zwei Matrizen ist immer $M \times M$ und wir können die Elemente explizit aufschreiben:

$$R_{ij} = \delta_{i,j} - \alpha e^{i\delta_{Mj}} \delta_{i+1,j}, \quad \text{mit } M+1 \cong 1 \text{ und } R \equiv R^\pm. \quad (5.8)$$

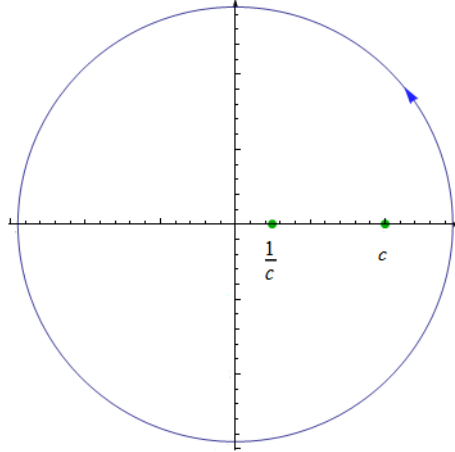
Die konjugiert-transponierte Matrix lautet dann

$$R_{ij}^\dagger = \delta_{i,j} - \alpha e^{-i\delta_{Mi}} \delta_{i,j+1}, \quad (5.9)$$

woraus folgt, dass R^\pm jeweils normale Matrizen sind. Demnach können diese Gaußintegrale mit Hilfe von (A.14) ausgewertet werden.

$$\gamma^{2s} Z_s = \lim_{M \rightarrow \infty} \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} d\lambda e^{-2i\lambda s} [\det(R^+) \det(R^-)]^{-1}$$

$$\begin{aligned}
&= \lim_{M \rightarrow \infty} \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} d\lambda e^{-2i\lambda s} \left[\left(1 - e^{i\lambda} \left(1 + \frac{\beta}{M}(\mu + r) \right)^M \right) \cdot \right. \\
&\quad \left. \cdot \left(1 - e^{i\lambda} \left(1 + \frac{\beta}{M}(\mu - r) \right)^M \right) \right]^{-1} \\
&= \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} d\lambda e^{-2i\lambda s} \left[(1 - \gamma e^{i\lambda} e^{\beta r}) (1 - \gamma e^{i\lambda} e^{-\beta r}) \right]^{-1} \\
&= \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} d\lambda \frac{e^{-2i\lambda s}}{(1 - c\gamma e^{i\lambda}) (1 - \frac{1}{c}\gamma e^{i\lambda})}, \text{ mit } c \equiv e^{\beta r} \\
&= \frac{1}{2\pi i} \int_0^{2\pi} d\lambda \frac{ie^{-i\lambda} e^{-i\lambda(2s+1)}}{\left(\frac{1}{\gamma} e^{-i\lambda} - c\right) \left(\frac{1}{\gamma} e^{-i\lambda} - \frac{1}{c}\right)} \cdot \frac{1}{\gamma^2} \\
&= \frac{1}{2\pi i} \oint_{|z|=\frac{1}{\gamma}} dz \frac{z^{2s+1}}{(z-c)(z-\frac{1}{c})} \gamma^{2s}
\end{aligned}$$



$$\begin{aligned}
&= \gamma^{2s} \sum_{|a| < \frac{1}{\gamma}} \text{Res}_a \left[\frac{z^{2s+1}}{(z-c)(z-\frac{1}{c})} \right] \\
&= \gamma^{2s} \left(\text{Res}_{\frac{1}{c}} \left[\frac{z^{2s+1}}{(z-c)(z-\frac{1}{c})} \right] + \text{Res}_c \left[\frac{z^{2s+1}}{(z-c)(z-\frac{1}{c})} \right] \right) \\
&= \gamma^{2s} \frac{1}{c - \frac{1}{c}} \left(c^{2s+1} - \frac{1}{c^{2s+1}} \right) \\
&= \gamma^{2s} \frac{\sinh\left(\frac{1}{2}B\beta(2s+1)\right)}{\sinh\left(\frac{1}{2}B\beta\right)}.
\end{aligned}$$

In der Rechnung wurde benutzt, dass das Wegintegral beide Residuen einschließt, was in der Tat durch (4.23) gerechtfertigt wird:

$$\mu < -r \Rightarrow \frac{1}{\gamma} = e^{-\beta\mu} > e^{\beta r} = \max \left\{ c, \frac{1}{c} \right\}. \quad (5.10)$$

Da wir nun für einen beliebigen Spin s die kanonische Zustandssumme Z_s bestimmt haben, können wir auch die großkanonische angeben. Diese berechnen wir ebenfalls mit Hilfe eines Pfadintegrals für kohärente Zustände:

$$Z(\gamma) = \lim_{M \rightarrow \infty} \int \left[\prod_{k=1}^M \prod_{\alpha} \frac{d\bar{\phi}_{\alpha}^k d\phi_{\alpha}^k}{2\pi i} \right] e^{-\sum_{k=1}^M \bar{\phi}^k \cdot \phi^k} \cdot \prod_{k=1}^M \exp \left[\left(\bar{\phi}^k \cdot \phi^{k-1} - \frac{\varepsilon}{\hbar} H(\phi^k, \phi^{k-1}) + \frac{\varepsilon}{\hbar} \mu \bar{\phi}^k \cdot \phi^{k-1} \right) \right].$$

Die Berechnung ist wesentlich einfacher, da die λ -Integration wegfällt und sonst alles identisch bleibt. Man erhält die gleichen Matrizen und damit auch die gleichen Determinanten. Dies alles ergibt:

$$\begin{aligned} Z(\gamma) &= \lim_{M \rightarrow \infty} \left[\left(1 - \left(1 + \frac{\beta}{M}(\mu + b) \right)^M \right) \left(1 - \left(1 + \frac{\beta}{M}(\mu - d) \right)^M \right) \right]^{-1} \\ &= \left[\left(1 - \gamma e^{\beta d} \right) \left(1 - \gamma e^{-\beta d} \right) \right]^{-1} \\ &= \frac{c}{(c - \gamma)(1 - \gamma c)}. \end{aligned}$$

Das Ergebnis wird durch einfaches Auswerten der geometrischen Reihen in (4.22) bestätigt, deren Konvergenz ebenfalls durch (5.10) gesichert ist. Wir fassen zusammen, dass für einen Spin vom Betrag s im Magnetfeld der Größe B

$$Z_s = \frac{\sinh \left(\frac{1}{2} B \beta (2s + 1) \right)}{\sinh \left(\frac{1}{2} B \beta \right)} \quad (5.11)$$

für die Zustandssumme gilt. Ist dagegen jede Größe des Spins möglich, erhalten wir die großkanonische Zustandssumme

$$Z(\gamma) = \frac{1}{(1 - e^{\beta(\mu+B/2)}) (1 - e^{\beta(\mu-B/2)})}. \quad (5.12)$$

Interessant ist noch die Erwähnung des mittleren Spins (in z -Richtung), welchen man gemäß des bekannten Zusammenhangs berechnen kann:

$$\langle S_z \rangle = \frac{1}{\beta} \frac{d}{dB} \ln Z(\gamma) = \frac{1}{1 - \gamma e^{\beta B/2}} - 1. \quad (5.13)$$

Entsprechend findet man für die Fluktuationen

$$\frac{\sqrt{\langle (S_z - \langle S_z \rangle)^2 \rangle}}{\langle S_z \rangle} = \frac{1}{\sqrt{2}} \frac{1}{\sqrt{\gamma e^{\beta B/2}}}, \quad (5.14)$$

welche die Schärfe der Verteilung angeben. Diese Ergebnisse sind thermische Mittelwerte und sollten nicht mit Erwartungswerten der Spinoperatoren in kohärenten Zuständen, z. B.

$$\langle S_z \rangle_\phi \equiv \frac{\langle \phi | S_z | \phi \rangle}{\langle \phi | \phi \rangle} = \frac{1}{2} (\overline{\phi_1 \phi_1} - \overline{\phi_2 \phi_2}) , \quad (5.15)$$

verwechselt werden. Dort wird die Verteilung, wie man es für Vielteilchensysteme kennt, für wachsende Erwartungswerte auch immer schärfer um diesen Mittelwert lokalisiert.

5.2. Heisenberg-Modell in Molekularfeldnäherung

Nun wenden wir uns wieder dem Heisenberg-Modell zu und berechnen die Zustandssumme in einer Molekularfeldnäherung:

$$H = -\frac{J}{2d} \sum_{\langle i,j \rangle} \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j - \mathbf{B} \cdot \sum_{i=1}^N \mathbf{S}_i = -\sum_i \mathbf{S}_i \cdot \left[\frac{J}{4d} \sum_{j|\langle j,i \rangle} \mathbf{S}_j + \mathbf{B} \right] . \quad (5.16)$$

Hier läuft die zweite Summe unter der Nebenbedingung, dass die Spins j in Nächst-neighbor-Wechselwirkung zum festen Spin i stehen. Da aber auch über jeden Spin i summiert wird, werden die Paarungen doppelt gezählt. Alles zusammen ergibt:

$$H = -\sum_i \mathbf{S}_i \cdot \left[\frac{J}{2} \langle \mathbf{S} \rangle_i + \mathbf{B} \right] , \quad \text{mit } \langle \mathbf{S} \rangle_i \equiv \frac{1}{2d} \sum_{j|\langle j,i \rangle} \mathbf{S}_j . \quad (5.17)$$

Die Molekularfeldnäherung setzt nun genau dort an, indem dieses gemittelte Feld unabhängig vom betrachteten Spin i ist, d. h.:

$$\mathbf{S}_\Sigma \equiv \langle \mathbf{S} \rangle \cong \langle \mathbf{S} \rangle_i \quad \text{für alle } i . \quad (5.18)$$

Damit reduziert sich das Heisenberg-Modell auf das im letzten Abschnitt berechnete Problem.

$$H = -\mathbf{B}_M \cdot \sum_i \mathbf{S}_i , \quad \text{mit } \mathbf{B}_M \equiv \frac{J}{2} \mathbf{S}_\Sigma + \mathbf{B} \quad (5.19)$$

$$= -B_M \sum_i S_i^z . \quad (5.20)$$

Hier legt nun das Molekularfeld die z -Richtung fest. Im Gegensatz zu vorhin handelt es sich nun um N Spins, sodass man das eingeführte Spinpfadintegral für mehrere Spins benutzen kann. Möchte man die kanonische Zustandssumme berechnen,

$$\begin{aligned} \gamma^{2s} Z_s &= \text{Spur} \left[e^{-\beta(H - \mu \mathbf{a}^\dagger \cdot \mathbf{a})} Q_s \right] \\ &= \int \left[\prod_{\alpha=1}^{2N} \frac{d\bar{\phi}_\alpha d\phi_\alpha}{2\pi i} \right] e^{-\bar{\phi} \cdot \phi} \langle \phi | e^{-\beta(H - \mu \mathbf{a}^\dagger \cdot \mathbf{a})} Q_s | \phi \rangle , \end{aligned}$$

so erkennt man mit (4.29), dass es sich um N gleiche Faktoren handelt. Das Ergebnis ist jedoch aus dem letzten Abschnitt bekannt, sodass man hier nichts Neues berechnen muss. Man erhält demnach

$$Z_s = \left[\frac{\sinh\left(\frac{1}{2}B_M\beta(2s+1)\right)}{\sinh\left(\frac{1}{2}B_M\beta\right)} \right]^N \quad (5.21)$$

für die Zustandssumme.

Unter der Annahme, dass der mittlere Spin in z -Richtung zeigt, leiten wir eine Selbstkonsistenzbedingung für diesen her, welche in der Molekularfeldnäherung erfüllt sein muss. Es gilt nämlich mit $|\mathbf{B}| = B$ folgender Zusammenhang:

$$\begin{aligned} \langle S^z \rangle &= \frac{1}{\beta} \frac{d}{dB} \ln \left[(Z_s)^{\frac{1}{N}} \right] \\ &= \frac{(2s+1)}{2} \coth \left[\frac{\beta}{2} (2s+1) \left(B + \frac{J}{2} \langle S^z \rangle \right) \right] - \frac{1}{2} \coth \left[\frac{\beta}{2} \left(B + \frac{J}{2} \langle S^z \rangle \right) \right] \end{aligned}$$

Der mittlere Spin gibt die Magnetisierung pro Gitterplatz an, die man durch Lösen der Selbstkonsistenzgleichung erhält. Durch eine Näherung für kleine Magnetfelder ist dies sogar analytisch möglich ist, auf was wir nun jedoch nicht eingehen möchten.

5.3. Heisenberg-Modell in unendlicher Dimensionalität

Wie eingangs erwähnt betrachten wir das Heisenberg-Modell in einem einfachen hyperkubischen Gitter, sodass die Anzahl der nächsten Nachbarn $z = 2d$ beträgt. Im Grenzfall $d \rightarrow \infty$ wächst somit auch die Summe der Wechselwirkungspaare. Es existiert demnach kein Unterschied zwischen dieser Limesbildung und dem Grenzfall unendlich hoher Dichte, welcher ausführlich und mathematisch von Paul A. Pearce und Colin J. Thompson in [PEA] und [THO] behandelt wurde. Diese Arbeiten zeigen, dass man die Ergebnisse der Molekularfeldnäherung als Lösung des exakten Heisenberg-Modells im Grenzfall hoher Dichten bzw. hoher Dimension erhält.

Ein weniger rigoroses, aber physikalisch verständliches, Argument möchten wir mit Pfadintegralen führen. Die benutzte Methodik wurde noch nicht vorgestellt, folgt aber weitgehend [NEG] und [GEO], in welchem die sogenannte *Cavity-Methode* für das wesentlich einfachere Ising-Modell behandelt wird. Die Übertragung auf das Heisenberg-Modell wird dort jedoch nicht geführt, was wir nun als Anwendung des Pfadintegralformalismus darstellen möchten.

Heisenberg-Modell in Schwinger-Bosonen

Wir nehmen wieder das isotrope Heisenberg-Modell für N Spins auf einem hyperkubischen Gitter hervor. Dieses kann man wie zu Beginn des Abschnittes erwähnt durch Einführung mehrerer Kopplungskonstanten J_{ij} verallgemeinern, was wir jedoch nur zur vereinfachten Schreibweise tun werden, d. h.

$$H = \sum_{i,j} J_{ij} \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j - \mathbf{B} \cdot \sum_{i=1}^N \mathbf{S}_i, \quad \text{mit } J_{ij} \equiv \begin{cases} -\frac{J}{4d} & i, j \text{ nächste Nachbarn} \\ 0 & \text{sonst} \end{cases}. \quad (5.22)$$

Um das Verhalten in hohen Dimensionen zu betrachten, lohnt es sich einen Spin herauszugreifen und zu betrachten. Sei dieser Spin derjenige am Gitterplatz $i = o$, dann gilt für den Hamiltonian:

$$H = -\mathbf{B} \cdot \mathbf{S}_o + \sum_{i=1}^N J_{oi} \mathbf{S}_o \cdot \mathbf{S}_i + \left[\sum_{i \neq o, j \neq o} J_{ij} \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j - \mathbf{B} \cdot \sum_{i \neq o} \mathbf{S}_i \right] \quad (5.23)$$

$$\equiv H_o + H_Q + H_F . \quad (5.24)$$

H_F ist der Hamiltonoperator für ein Heisenberg-Modell ohne den genannten Spin an der Stelle $i = o$. Es entsteht demnach ein Modell mit einer *Fehlstelle*.

Nun führen wir, wie schon in der Molekularfeldnäherung, für jeden Gitterplatz Schwinger-Bosonen (a_i, b_i) ein und berücksichtigen die Einschränkung (4.24). Das Magnetfeld soll wie üblich die z -Richtung festlegen.

$$H_o = -\frac{B}{2} (a_o^\dagger a_o - b_o^\dagger b_o) \quad (5.25)$$

$$H_Q = \sum_{i=1}^N \frac{J_{oi}}{2} \left[(a_o^\dagger a_o a_i^\dagger a_i) + (a_o^\dagger b_o b_i^\dagger a_i) + (b_o^\dagger a_o a_i^\dagger b_i) + (b_o^\dagger b_o b_i^\dagger b_i) - 4s^2 \right] . \quad (5.26)$$

H_F hat offensichtlich die Struktur von beiden Ausdrücken, was im weiteren Verlauf jedoch unwesentlich ist. Wichtig ist es nun

$$H = H(\mathbf{a}^\dagger, \mathbf{a}) = H_o(\mathbf{a}_o^\dagger, \mathbf{a}_o) + H_Q(\mathbf{a}^\dagger, \mathbf{a}) + H_F \left((\mathbf{a}_i^\dagger)_{i \neq o}, (\mathbf{a}_i)_{i \neq o} \right) \quad (5.27)$$

festzuhalten, wobei hier die eingeführte Notation für Schwinger-Bosonen, insbesondere $\mathbf{a}_i \equiv (a_i, b_i)$, verwendet wurde. Mit diesem Ergebnis übernehmen wir das Spinfadintegral für N -Spins:

$$\begin{aligned} \text{Spur} \left[e^{-\beta H} Q_s \right] &= \lim_{M \rightarrow \infty} \int_0^{2\pi} \left[\prod_{j=1}^N \frac{d\lambda_j}{2\pi} e^{-2i\lambda_j s} \right] \int \left[\prod_{k=1}^M \prod_{\alpha=1}^{2N} \frac{d\bar{\phi}_\alpha^k d\phi_\alpha^k}{2\pi i} \right] \\ &e^{-\sum_{k=1}^M \bar{\phi}^k \cdot \phi^k} \prod_{k=2}^M \exp \left[\bar{\phi}^k \cdot \phi^{k-1} - \frac{\varepsilon}{\hbar} H(\phi^k, \phi^{k-1}) \right] \cdot \\ &\cdot \exp \left[\bar{\phi}^1 \cdot \Phi^0(\lambda) - \frac{\varepsilon}{\hbar} H(\phi^1, \Phi^0(\lambda)) \right] . \quad (5.28) \end{aligned}$$

Nun ist die Idee, dass wir die λ -Integration nach allen Spins, bis aus auf den Spin mit $i = o$, zumindest formal ausführen. Diese Integration wirkt auf den letzten Faktor, da dieser von allen λ_i abhängig ist, sodass es erst einmal notwendig ist das Symbol von H in diesem Fall umzuschreiben:

$$H_o(\phi^1, \Phi^0(\lambda)) = H_o \left((\phi_o^1, \phi_{o+1}^1), (e^{i\lambda_o} \phi_o^0, e^{i\lambda_o} \phi_{o+1}^0) \right) \quad (5.29)$$

$$= -\frac{B}{2} \left(\bar{\phi}_o^1 e^{i\lambda_o} \phi_o^0 - \bar{\phi}_{o+1}^1 e^{i\lambda_o} \phi_{o+1}^0 \right) = e^{i\lambda_o} H_o(\phi^1, \phi^0) . \quad (5.30)$$

Den *Quellenterm* H_Q benötigen wir später in einer Kontinuumsnäherung:

$$H_Q(\phi^k, \phi^{k-1}) = \sum_{i=1}^N J_{oi} \mathbf{S}_o^k \cdot \mathbf{S}_i^k, \text{ mit } \mathbf{S}_j^k \equiv \langle \phi^k | \mathbf{S}_j | \phi^{k-1} \rangle. \quad (5.31)$$

Entsprechend zu H_o ergibt sich das letzte Matricelement einfach als

$$H_Q(\phi^1, \Phi^0(\lambda)) = \sum_{j=1}^N J_{oj} e^{i(\lambda_j + \lambda_o)} \mathbf{S}_o^1 \cdot \mathbf{S}_j^1. \quad (5.32)$$

Hier wurden die Spinoperatoren durch Schwinger-Bosonen in komplexe Zahlen überführt und letztendlich als klassische Spins umgeschrieben. Dies hat den Vorteil, dass wir die Darstellung als ein Feld

$$\mathbf{J}_i^k \equiv J_{oi} \mathbf{S}_o^k, \quad (5.33)$$

welches auf den i -ten Spin wirkt, interpretieren können.

Nun berechnen wir, wie beschrieben, die Integration im Spinpfadintegral. Dabei kann man für H_F auch die ϕ -Integrationen ausführen, was im Gesamten die Zustandssumme Z_F für ein Heisenberg-Modell mit einer Fehlstelle liefert.

$$\begin{aligned} \text{Spur} \left[e^{-\beta H} Q_s \right] &= \lim_{M \rightarrow \infty} \int_0^{2\pi} \frac{d\lambda_o}{2\pi} e^{-2i\lambda_o s} \int \left[\prod_{k=1}^M \frac{d\bar{\phi}_o^k d\phi_o^k}{2\pi i} \frac{d\bar{\phi}_{o+1}^k d\phi_{o+1}^k}{2\pi i} \right] \\ &e^{-\sum_{k=1}^M (\bar{\phi}_o^k \phi_o^k + \bar{\phi}_{o+1}^k \phi_{o+1}^k)} \\ &\cdot \prod_{k=1}^M \exp \left[e^{i\lambda_o \delta_{1k}} \left((\bar{\phi}_o^k \phi_o^k + \bar{\phi}_{o+1}^{k-1} \phi_{o+1}^{k-1}) - \frac{\varepsilon}{\hbar} H_o(\phi^k, \phi^{k-1}) \right) \right] \cdot \\ &\cdot Z_F e^{W[\mathbf{J}]}, \quad \text{mit } \mathbf{J} \equiv (\mathbf{J}_1, \dots, \mathbf{J}_N). \end{aligned} \quad (5.34)$$

Der erste Teil der Formel ist in der Tat das schon gelöste Problem, jedoch wird die weitere Berechnung durch den scheinbar einfachen Ausdruck $e^{W[\mathbf{J}]}$ behindert. Die weitere Analyse im diskreten Pfadintegralformalismus ist weder übersichtlich noch einfach auszuführen, sodass wir die weiteren Ideen in der Kontinuumsbeschreibung erklären möchten.

Sichtweise des kontinuierlichen Pfadintegrals

Der zusätzliche Faktor in (5.34) beinhaltet die Integration nach allen verbliebenen ϕ -Variablen. Damit die wesentlichen Dinge zu erkennen sind, verwenden wir hier die übersichtliche kontinuierliche Schreibweise (siehe (3.38)):

$$\begin{aligned} Z_F e^{W[\mathbf{J}]} &\equiv \int \mathcal{D}[\psi] \exp \left[- \int_0^\beta d\tau \left(\overline{\psi(\tau)} \cdot \frac{\partial \psi(\tau)}{\partial \tau} + H_F(\psi(\tau), \psi(\tau)) \right) \right] \cdot \\ &\cdot \exp \left[- \int_0^\beta d\tau \sum_{i \neq o} \mathbf{J}_i(\tau) \cdot \mathbf{S}_i(\tau) \right] \end{aligned} \quad (5.35)$$

$$= Z_F \left\langle \exp \left[- \int_0^\beta d\tau \sum_{i \neq o} \mathbf{J}_i(\tau) \cdot \mathbf{S}_i(\tau) \right] \right\rangle_F. \quad (5.36)$$

Hier bezeichnet ψ das Tupel von komplexen Zahlen ϕ , in welchem ϕ_o und ϕ_{o+1} entfernt wurden. Wie man sieht, kann man die Exponentialfunktion als thermischen Mittelwert zu H_F ausdrücken und demnach gilt auch

$$W[\mathbf{J}] = \ln \left\langle \exp \left[- \int_0^\beta d\tau \sum_{i \neq o} \mathbf{J}_i(\tau) \cdot \mathbf{S}_i(\tau) \right] \right\rangle_F . \quad (5.37)$$

Nach [NEG] erhält man, analog zur statistischen Mechanik, die Erwartungswerte von $\mathbf{S}_i(\tau)$, durch Ableiten, d. h.:

$$\left. \frac{\delta W}{\delta J_i^\gamma(\tau)} \right|_{\mathbf{J}=0} = - \langle S_i^\gamma(\tau) \rangle_F , \text{ mit } \gamma \in \{x, y, z\} . \quad (5.38)$$

Entsprechend liefern höhere Ableitungen die verbundenen Korrelationsfunktionen zwischen den Spins:

$$\left. \frac{\delta^2 W}{\delta J_i^\gamma(\tau) \delta J_{i'}^{\gamma'}(\tau')} \right|_{\mathbf{J}=0} = \langle S_i^\gamma(\tau) S_{i'}^{\gamma'}(\tau') \rangle_F - \langle S_i^\gamma(\tau) \rangle_F \langle S_{i'}^{\gamma'}(\tau') \rangle_F \quad (5.39)$$

$$\equiv \langle S_i^\gamma(\tau) S_{i'}^{\gamma'}(\tau') \rangle_F^c \quad (5.40)$$

Mit diesen Ergebnissen können wir das Funktional W nach den Quellen J_i^γ entwickeln. Näheres dazu findet man zum Beispiel in Falle des Ising-Modells in [GEO]. Die auftretende Integrationskonstante bezeichnen wir mit C und dann gilt:

$$W[\mathbf{J}] = C + \sum_{n=1}^{\infty} \left[\frac{(-1)^n}{n!} \int_0^\beta d\tau_1 \cdots d\tau_n \sum_{i_1 \cdots i_n \neq o} \sum_{\gamma_1 \cdots \gamma_n} J_{i_1}^{\gamma_1}(\tau_1) \cdots J_{i_n}^{\gamma_n}(\tau_n) \langle S_{i_1}^{\gamma_1}(\tau_1) \cdots S_{i_n}^{\gamma_n}(\tau_n) \rangle_F^c \right] .$$

Da die Kopplungskonstanten exponentiell als Funktion des Abstandes abfallen, reduziert sich diese Entwicklung im Grenzwert $d \rightarrow \infty$ auf den ersten Term, d. h. $n = 1$. Physikalisch bedeutet dies, dass die Korrelationen zwischen den einzelnen Spins verschwinden und unsere Funktion in die einfache Gestalt

$$W[\mathbf{J}(\tau)] \longrightarrow C - \sum_{i \neq o} \int_0^\beta d\tau \mathbf{J}_i(\tau) \cdot \langle \mathbf{S}_i(\tau) \rangle_F \quad (5.41)$$

übergeht. Wenn wir dies folgendermaßen umschreiben,

$$\sum_{i \neq o} \mathbf{J}_i(\tau) \cdot \langle \mathbf{S}_i(\tau) \rangle_F = \mathbf{S}_o(\tau) \sum_{i \neq o} \langle \mathbf{S}_i(\tau) \rangle_F J_{io} \equiv \mathbf{S}_o(\tau) \cdot \tilde{\mathbf{B}}(\tau) = \mathbf{S}_o(\tau) \cdot \tilde{\mathbf{B}} ,$$

erhalten wir das folgende Ergebnis:

$$W[\mathbf{J}(\tau)] \longrightarrow C - \tilde{\mathbf{B}} \cdot \int_0^\beta d\tau \mathbf{S}_o(\tau) . \quad (5.42)$$

Dies ist wieder das bekannte Problem eine Spins im Magnetfeld, was wir zeigen wollten.

5.4. Ausblick

Ziel dieses Abschnittes war ein qualitativer Überblick über die Pfadintegralmethoden im Hinblick auf das Heisenberg-Modell im Grenzwert hoher Dimensionen. Sowohl die Berechnung des diskreten als auch des kontinuierlichen Pfadintegrals können genauer ausgeführt werden, was man auch tun muss um wirklich das Molekularfeldergebnis zu erhalten. Wir wollen es jedoch bei der skizzierten Idee belassen, da die wesentlichen und erklärenden Rechnungen schon für das Beispiel des Spins im Magnetfeld geführt wurden. Diese zeigten, dass man die kompliziert aussehenden Pfadintegralformeln exakt auswerten kann und auch die richtigen Ergebnisse erhält.

Pfadintegrale sind ein wichtiges Werkzeug der Physik, welches vor allem in der Quantenmechanik und Quantenfeldtheorie verwendet wird. Aus dem Grunde wurde in dieser Arbeit der kanonische Formalismus hergeleitet und im Hinblick auf Vielteilchensysteme verallgemeinert. Das dargestellte Spinpfadintegral zeigte, dass der Formalismus mitnichten starr und unhandlich ist, sondern beliebig angepasst werden kann um korrekte Ergebnisse in der jeweiligen Situation zu erhalten. Der letzte Abschnitt demonstrierte zudem, dass auch die Kontinuumsversion hilfreich und für konkrete Rechnungen geeignet ist.

A. Anhang

Der mathematische Rahmen der Quantenmechanik besteht aus einem meist separablen Hilbertraum \mathcal{H} , dessen Strahlen physikalische Zustände darstellen. Als Repräsentant wird immer ein normierter Vektor aus \mathcal{H} gewählt. Eine Observable wird durch einen selbstadjungierten linearen Operator $A : \mathcal{H} \supseteq \mathcal{D}(A) \rightarrow \mathcal{H}$ beschrieben. Der Definitionsbereich ist selten wirklich der gesamte Hilbertraum, sodass wir diesen im Folgenden immer angeben werden.

Sei nun $\mathcal{H} \equiv L^2(\mathbb{R}^d)$ der komplexe Hilbertraum der quadratisch Lebesgue-integrierbaren Funktionen. Zur Vereinfachung schreiben wir sowohl $|\psi\rangle$ als auch ψ für einen (normierten) Vektor aus \mathcal{H} .

A.1. Ort- und Impulsoperator

Der *Ortsoperator* ist ein Multiplikationsoperator, für den mit $i \in \{1, \dots, d\}$ gilt:

$$X_i : \mathcal{D}(X_i) \rightarrow \mathcal{H}, \text{ mit } \mathcal{D}(X_i) \equiv \left\{ \psi \in \mathcal{H} \mid \int d\mathbf{x} |x_i \psi(\mathbf{x})|^2 < \infty \right\}$$
$$(X_i \psi)(\mathbf{x}) = x_i \psi(\mathbf{x}).$$

Man fasst diese d Operatoren zu einem vektorwertigen Operator zusammen:

$$\mathbf{X} \equiv \begin{pmatrix} X_1 \\ \vdots \\ X_d \end{pmatrix}, \text{ mit } \mathcal{D}(\mathbf{X}) \equiv \mathcal{D}(X_1) \cap \dots \cap \mathcal{D}(X_d). \quad (\text{A.1})$$

Der *Impulsoperator* ist ein Differentiationsoperator, für den mit $i \in \{1, \dots, d\}$ gilt:

$$P_i : \mathcal{D}(P_i) \rightarrow \mathcal{H}, \text{ mit } \mathcal{D}(P_i) \equiv \left\{ \psi \in \mathcal{H} \mid \int d\mathbf{x} \left| \frac{\partial}{\partial x_i} \psi(\mathbf{x}) \right| < \infty \right\}$$
$$(P_i \psi)(\mathbf{x}) = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x_i} \psi(\mathbf{x}).$$

Auch hier definiert man analog einen vektorwertigen Operator $\mathbf{P} \equiv \frac{\hbar}{i} \nabla$.

A.2. Verallgemeinerte Eigenvektoren

Ein lineares Funktional $T : \mathcal{H} \supseteq \mathcal{D}(T) \rightarrow \mathbb{C}$ mit $T \neq 0$ heißt *verallgemeinerter Eigenvektor* des Operators A zum Eigenwert $\lambda \in \mathbb{C}$, wenn gilt:

$$T(A\psi) = \lambda T(\psi), \text{ für alle } \psi \in \mathcal{D}(A) \subseteq \mathcal{H}. \quad (\text{A.2})$$

Die Zahl λ liegt dann im Spektrum von A .

A.3. Orts- und Impulseigenvektoren

Wir definieren nun die verallgemeinerten Eigenvektoren des Ortsoperators \mathbf{X} und des Impulsoperators \mathbf{P} . Die Delta-Distribution bzw. die Fouriertransformation, ausgewertet an einer Stelle, erfüllen jeweils die Bedingung (A.2), wie man leicht nachprüft. Als Notation führen wir ein:

$$\langle \mathbf{x} | \equiv \delta_{\mathbf{x}}(\cdot), \text{ als verallgemeinerter Eigenvektor von } \mathbf{X} \text{ zum Eigenwert } \mathbf{x}, \quad (\text{A.3})$$

$$\langle \mathbf{p} | \equiv \mathcal{F}(\cdot)(\mathbf{p}), \text{ als verallgemeinerter Eigenvektor von } \mathbf{P} \text{ zum Eigenwert } \mathbf{p}. \quad (\text{A.4})$$

Hier bezeichnet \mathcal{F} die Fouriertransformation auf $L^2(\mathbb{R}^d)$. Die obigen Symbole sind als Funktionale wohldefiniert, aber man möchte auch zugeordnete Ket-Vektoren entwerfen. Diese existieren jedoch nicht als Vektoren im Hilbertraum, sodass man sich auf folgende symbolische Notation zurückzieht,

$$|\mathbf{x}\rangle \equiv \delta^{(d)}(\mathbf{x} - \cdot), \quad |\mathbf{p}\rangle \equiv \left(\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \right)^d e^{\frac{i}{\hbar}\mathbf{p}\cdot}, \quad (\text{A.5})$$

wobei hier die Deltafunktion als Grenzwert einer Funktionenfolge und der Punkt für die Variable der Wellenfunktion steht. Diese Ausdrücke sind deswegen nur unter einem Integral sinnvoll und wohldefiniert.

A.4. Trotter Produktformel

Seien A und B selbstadjungierte lineare Operatoren in \mathcal{H} und die Summe $A + B$ sei ebenfalls selbstadjungiert auf $\mathcal{D}(A) \cap \mathcal{D}(B)$, dann gilt

$$\text{s-lim}_{n \rightarrow \infty} \left(e^{itA/n} e^{itB/n} \right)^n = e^{it(A+B)} \quad (\text{A.6})$$

und

$$\text{s-lim}_{n \rightarrow \infty} \left(e^{-tA/n} e^{-tB/n} \right)^n = e^{-t(A+B)}, \text{ für } t \geq 0. \quad (\text{A.7})$$

Hier steht s-lim für den Grenzwert in der starken Operator-topologie.

Beweis: 1. Fall: Wir beweisen zuerst den einfachen Fall, in welchem A und B beschränkt sind. Setze dafür

$$S_n \equiv e^{it(A+B)/n}, \text{ und } T_n \equiv e^{itA/n} e^{itB/n}$$

und betrachte:

$$\begin{aligned} S_n^n - T_n^n &= S_n^n + \sum_{k=1}^{n-1} T_n^k S_n^{n-k} - \sum_{k=0}^{n-2} T_n^{k+1} S_n^{n-k-1} - T_n^n \\ &= \sum_{k=0}^{n-1} T_n^k S_n^{n-k} - \sum_{k=0}^{n-1} T_n^{k+1} S_n^{n-k-1} = \sum_{k=0}^{n-1} T_n^k (S_n - T_n) S_n^{n-k-1} \end{aligned}$$

Beachtet man, dass

$$\begin{aligned} \|S_n - T_n\| &= \\ &= \left\| \left(\mathbb{1} + \frac{it}{n}(A+B) + \dots \right) - \left(\mathbb{1} + \frac{it}{n}A + \dots \right) \left(\mathbb{1} + \frac{it}{n}B + \dots \right) \right\| \\ &\leq C_1 \frac{1}{n^2}, \text{ mit } C_1 \text{ als Konstante, für } n \text{ groß genug,} \end{aligned}$$

gilt, dann folgt sofort

$$\begin{aligned} \|S_n^n - T_n^n\| &\leq \sum_{k=0}^{n-1} \|T_n\|^k \|S_n - T_n\| \|S_n\|^{n-k-1} \\ &\leq \max[\|T_n\|, \|S_n\|]^{n-1} \cdot \sum_{k=0}^{n-1} \|S_n - T_n\| \\ &\leq n \|S_n - T_n\| e^{(\|A\| + \|B\|)t} \\ &\leq C_2 \frac{1}{n} \longrightarrow 0 \end{aligned}$$

2. Fall: Der allgemeine Fall wird mit ähnlichen Ideen in [RSI] behandelt. \square

Der Satz gilt übrigens auch unter der schwächeren Voraussetzung, dass $A + B$ nur wesentlich selbstadjungiert ist.

A.5. Tensorprodukt von Hilberträumen

Für zwei Hilberträume \mathcal{H}_1 und \mathcal{H}_2 möchte man einen Produktraum definieren, welcher ebenfalls wieder ein Hilbertraum ist. Ein Hilbertraum \mathcal{H} mit einer bilinearen Verknüpfung

$$\begin{aligned} \otimes : \mathcal{H}_1 \times \mathcal{H}_2 &\longrightarrow \mathcal{H} \\ (x, y) &\longmapsto x \otimes y \end{aligned}$$

heißt *Realisierung des Tensorproduktes* von \mathcal{H}_1 und \mathcal{H}_2 , wenn folgende drei Eigenschaften erfüllt sind:

$$(1) \text{ lin } \{x \otimes y \mid x \in \mathcal{H}_1, y \in \mathcal{H}_2\} \text{ ist dicht in } \mathcal{H} \quad (\text{A.8})$$

$$(2) \langle x \otimes y \mid x' \otimes y' \rangle = \langle x \mid x' \rangle_1 \langle y \mid y' \rangle_2 \text{ für alle } x, x' \in \mathcal{H}_1, y, y' \in \mathcal{H}_2 \quad (\text{A.9})$$

Wir schreiben dann $\mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2 \equiv \mathcal{H}$ und sprechen vom *Tensorprodukt von Hilberträumen*. Wohlgermerkt haben wir nicht die Existenz einer Realisierung des Tensorproduktes bewiesen, was jedoch durch eine konstruktive Definition des Tensorprodukts, zum Beispiel in [GOL], getan wird. Diese zeigt übrigens auch, dass alle Realisierungen des Tensorprodukts von \mathcal{H}_1 und \mathcal{H}_2 isomorph zueinander sind, sodass man sich wirklich auf die Eigenschaften (A.8) und (A.9) beschränken kann.

A.6. Ein unendlich dimensionales Integral

Um ein einfaches Beispiel eines Integral mit unendlich vielen Integrationen zu demonstrieren, betrachten wir das N -dimensionale Gaußintegral mit $\mathbf{x}, \mathbf{b} \in \mathbb{R}^N$ und einer symmetrischen positiv definiten Matrix $A \in \mathbb{R}^{N \times N}$:

$$\frac{1}{\pi^{N/2}} \int d^N \mathbf{x} e^{-\mathbf{x}^T A \mathbf{x} + \mathbf{x} \cdot \mathbf{b}} = \frac{e^{\frac{1}{4} \mathbf{b}^T A^{-1} \mathbf{b}}}{\sqrt{\det(A)}}. \quad (\text{A.10})$$

Das ist ein bekanntes und durchaus interessantes Ergebnis, da die Formel auf der rechten Seite für beliebiges N gilt.

Die Formel möchten wir verallgemeinern und gehen nun von einer Folge von reellen Zahlen $\mathbf{b} \equiv (b_1, b_2, \dots)$ und einer Folge von positiven Zahlen $(\lambda_1, \lambda_2, \dots)$ aus. Letztere ordnen wir, für ein endliches N , in einer Diagonalmatrix an:

$$A_N \equiv \begin{pmatrix} \lambda_1 & & \\ & \ddots & \\ & & \lambda_N \end{pmatrix}, \quad \mathbf{b}_N \equiv \begin{pmatrix} b_1 \\ \vdots \\ b_N \end{pmatrix}. \quad (\text{A.11})$$

Das heißt, wir können (A.10) für jedes $N \in \mathbb{N}$ anwenden. Wenn nun sogar die Ausdrücke $\sum_{k=1}^{\infty} b_k^2 \lambda_k^{-1}$ und $\prod_{k=1}^{\infty} \lambda_k$ existieren, ergibt sogar der Grenzwert N nach unendlich einen endlichen Wert. Wir schreiben dann

$$\int \left[\prod_{i=1}^{\infty} \frac{dx_i}{\sqrt{\pi}} \right] e^{-\mathbf{x}^T A \mathbf{x} + \mathbf{x} \cdot \mathbf{b}} \equiv \lim_{N \rightarrow \infty} \int \frac{dx_1}{\sqrt{\pi}} \dots \frac{dx_N}{\sqrt{\pi}} e^{-\mathbf{x}^T A_N \mathbf{x} + \mathbf{x} \cdot \mathbf{b}_N}. \quad (\text{A.12})$$

Wohlgemerkt hat hier \mathbf{x} links und rechts verschiedene Bedeutungen. Nun können wir in der Tat dem unendlich dimensionalen Integral einen Wert zuordnen:

$$\int \left[\prod_{i=1}^{\infty} \frac{dx_i}{\sqrt{\pi}} \right] e^{-\mathbf{x}^T A \mathbf{x} + \mathbf{x} \cdot \mathbf{b}} = \frac{e^{\frac{1}{4} \sum_{k=1}^{\infty} b_k^2 \lambda_k^{-1}}}{\sqrt{\prod_{k=1}^{\infty} \lambda_k}}. \quad (\text{A.13})$$

A.7. Gaußintegral für normale Matrizen

Sei A eine $M \times M$ positiv definite normale Matrix und $\mathbf{z} \in \mathbb{C}^M$ dann gilt:

$$\int \left[\prod_{k=1}^M \frac{d\bar{z}_k dz_k}{2\pi i} \right] e^{-\bar{\mathbf{z}}^T A \mathbf{z}} = \frac{1}{\det(A)}. \quad (\text{A.14})$$

Beweis: Die normale Matrix A können wir in Diagonalgestalt D transformieren. Teilt man dann $\mathbf{z} = \mathbf{x} + i\mathbf{y}$ in Realteil und Imaginärteil auf, sodass $\bar{\mathbf{z}}^T D \mathbf{z} = \mathbf{x}^T D \mathbf{x} + \mathbf{y}^T D \mathbf{y}$ gilt, hat man das bekannte Gaußintegral (A.10). Wurzeln von komplexen Zahlen sind immer als deren Hauptwert (principal value) zu verstehen. \square

A.8. Graßmann-Algebra

Definition der Graßmann-Algebra

Um die charakteristische Antivertauschungsrelation für Fermionen zu berücksichtigen, ist es notwendig sich auf eine antisymmetrische Struktur zu beziehen. Eine Graßmann-Algebra ist ein 2^n -dimensionaler komplexer Vektorraum \mathcal{G} mit einer assoziativen

Multiplikation¹ $\wedge : \mathcal{G} \times \mathcal{G} \longrightarrow V$, für welchen n linear unabhängige Elemente $\{\eta_i\} \subseteq \mathcal{G}$ und eine Eins $\mathbb{1} \in V$ existieren, sodass folgendes gilt:

(a) Die Elemente antikommutieren:

$$\eta_i \wedge \eta_j = -\eta_j \wedge \eta_i \quad \text{für alle } i, j \in \{1, \dots, n\} \quad (\text{A.15})$$

(b) Jedes $A \in \mathcal{G}$ hat folgende Form:

$$A = c_0 \mathbb{1} + \sum_{i=1}^n c_i \eta_i + \sum_{i_1 < i_2} c_{i_1 i_2} \eta_{i_1} \eta_{i_2} + \dots + \sum_{i_1 < i_2 < \dots < i_n} c_{i_1 \dots i_n} \eta_{i_1} \dots \eta_{i_n} \quad (\text{A.16})$$

Dabei gilt $c_I \in \mathbb{C}$ für jeden genannten Index I und $\eta_i \eta_j \equiv \eta_i \wedge \eta_j$.

Man nennt die Menge $\{\mathbb{1}, \eta_1, \dots, \eta_n\}$ die *Erzeuger* der Graßmann-Algebra \mathcal{G} . Im Folgenden wird das Einselement nicht mehr explizit ausgeschrieben, sodass man nur noch von den Erzeugern $\{\eta_i\}$ spricht. Die Elemente der Graßmann-Algebra nennt man auch häufig *Graßmann-Variablen*.

Für die genannten Zwecke reicht die Definition noch nicht aus. Wird die Algebra \mathcal{G} von einer geraden Anzahl von Elementen erzeugt, so kann man diese in zwei Menge $\{\eta_1, \dots, \eta_n\}$ und $\{\bar{\eta}_1, \dots, \bar{\eta}_n\}$ aufspalten und eine Konjugation $*$ auf \mathcal{G} durch

$$(\eta_i)^* = \bar{\eta}_i, \quad (\bar{\eta}_i)^* = \eta_i \quad (\text{A.17})$$

$$(\lambda A + B)^* = \bar{\lambda} A^* + B^* \quad (\text{A.18})$$

$$(AB)^* = B^* A^*, \quad \text{für alle } i \in \{1, \dots, n\}, A, B \in \mathcal{G}, \lambda \in \mathbb{C} \quad (\text{A.19})$$

definieren, wobei $\bar{\lambda}$ die normale komplexe Konjugation bezeichnet.

Die Erweiterung auf eine unendlich dimensionale Graßmann-Algebra mit abzählbar vielen Erzeugern ist auch möglich, wobei sich dann (A.16) in eine unendliche Summe vergrößert, jedoch alle anderen Eigenschaften unverändert bleiben.

Differentiation und Integration in der Graßmann-Algebra

Nun möchten wir eine Ableitung und Integration für Graßmann-Variablen definieren. Dabei handelt es sich jedoch um rein algebraische Formulierungen und diese sollten auch so aufgefasst werden. Um dabei den Sprachgebrauch zu übernehmen spricht man meistens von *Funktionen*, die differenziert und integriert werden, meint jedoch immer Graßmann-Variablen. Zum Beispiel schreibt man (A.16) folgendermaßen um:

$$f(\eta_i) = A_0 + \eta_i A_1, \quad \text{mit } A_0, A_1 \in \mathcal{G}. \quad (\text{A.20})$$

¹Assoziative Multiplikation bedeutet hier explizit, dass für alle $a, b, c \in \mathcal{G}$, und $\lambda \in \mathbb{C}$ gilt:

$$(1) (a \wedge b) \wedge c = a \wedge (b \wedge c)$$

$$(2) a \wedge (b + c) = a \wedge b + a \wedge c \quad \text{und} \quad (b + c) \wedge a = b \wedge a + c \wedge a$$

$$(3) \lambda(a \wedge b) = (\lambda a) \wedge b = a \wedge (\lambda b).$$

Dabei enthalten die Koeffizienten wohlgermerkt nicht die Graßmann-Variable η_i . Möchte man zwei bestimmte Erzeuger herausheben, benutzt man ebenfalls an Funktionen angelehnte Schreibweisen:

$$g(\bar{\eta}_i, \eta_j) = B_0 + \eta_j B_1 + \bar{\eta}_i \bar{B}_1 + \bar{\eta}_i \eta_j B_{12} . \quad (\text{A.21})$$

Wichtig in diesem Zusammenhang ist, dass man auch jede analytische Funktion $h : \mathbb{C} \rightarrow \mathbb{C}$ mit $h(x) = \sum_{k=0}^{\infty} h_k x^k$ auf Graßmann-Variablen fortsetzen kann:

$$h(\eta_i) = h_0 + \eta_i h_1 . \quad (\text{A.22})$$

Alle höheren Potenzen verschwinden aufgrund der Antivertauschungsrelation, was die Rechnungen in der Graßmann-Algebra sehr vereinfacht.

Man definiert nun die Ableitung und das Integral von einer Funktion f folgendermaßen:

$$\int d\eta_i f \equiv \frac{\partial f}{\partial \eta_i} \equiv A_1 . \quad (\text{A.23})$$

Zu beachten ist, dass somit eine Linksableitung und Linksintegration definiert ist, da ein Vertauschen von zwei Graßmann-Variablen ein Vorzeichen einbringt. Die Übertragung auf die Funktion g und Mehrfachableitungen funktioniert mit den üblichen Regeln der Analysis, bzw. als Nacheinanderausführung. Es existieren auch besondere Produktregeln und partielle Integrationen, die man sich leicht herleiten kann.

Der für uns wichtige Zusammenhang ist jedoch die Integration der Gaußfunktion analog zum komplexen Fall:

$$\int \left[\prod_{k=1}^M d\bar{\eta}_k d\eta_k \right] e^{-\bar{\eta}^T A \eta} = \det(A) , \text{ mit } \boldsymbol{\eta} \equiv (\eta_1, \dots, \eta_M)^T . \quad (\text{A.24})$$

A.9. Erweiterter Fockraum

Der bekannte Fockraum $\mathcal{F}(\mathcal{H})$ wird zu einem sogenannten erweiterten Fockraum $\mathcal{F}_{\mathcal{G}}$, wenn man ihn um die Graßmann-Algebra \mathcal{G} ergänzt. Dazu definiert man, analog zur skalaren Multiplikation in einem Vektorraum, eine Verknüpfung

$$\cdot : \mathcal{G} \times \mathcal{F} \rightarrow \mathcal{F}_{\mathcal{G}} , \quad (\eta, \Psi) \mapsto \eta \cdot \Psi \equiv \eta \Psi , \quad (\text{A.25})$$

welche für alle $\Psi, \Phi \in \mathcal{F}$ und $\eta, \eta_1, \eta_2 \in \mathcal{G}$ folgende Eigenschaften hat:

$$\begin{aligned} (\eta_1 \eta_2) \Psi &= \eta_1 (\eta_2 \Psi) \\ (\eta_1 + \eta_2) \Psi &= \eta_1 \Psi + \eta_2 \Psi \\ \eta (\Psi + \Phi) &= \eta \Psi + \eta \Phi . \end{aligned}$$

Für $\mathcal{G} \times \mathcal{F}$ mit dieser Verknüpfung schreiben wir $\mathcal{F}_{\mathcal{G}}$ und nennen dies den erweiterten Fockraum. Die Eigenschaften der Abbildung sind tatsächlich diese einer skalaren Multiplikation, wenn wir die einzige fehlende ergänzen:

$$\mathbb{1} \Psi \cong \Psi , \text{ mit der Eins von } \mathcal{G} . \quad (\text{A.26})$$

Mit dieser Identifizierung ist der Fockraum \mathcal{F} im erweiterten \mathcal{F}_G enthalten.

Da Operatoren nur für Vektoren in \mathcal{F} erklärt sind, definiert man die Wirkung auf ein Element des erweiterten Fockraumes. Es reicht aus diese Definition für Vernichtungs- und Erzeugungsoperatoren, beide mit \tilde{a} abgekürzt, festzusetzen:

$$\tilde{a}(\eta\Psi) \equiv -\eta(\tilde{a}\Psi). \quad (\text{A.27})$$

A.10. Unterraum der Schwinger-Bosonen

Sei $s \in \frac{1}{2}\mathbb{N}$ fest und $\mathcal{H} = \mathbb{C}^2$ der gewählte zweidimensionale Hilbertraum mit kanonischer Basis, $|\alpha\rangle \equiv (1, 0)$ und $|\beta\rangle \equiv (0, 1)$. \mathcal{H}_N bezeichnet wieder das N -fache Tensorprodukt von Hilberträumen. Der zugeordnete symmetrische Fockraum

$$\mathcal{F}_+ \equiv \bigoplus_{N=0}^{\infty} \mathcal{P}_+ \mathcal{H}_N = \bigoplus_{n=0}^{\infty} \mathcal{P}_+ \mathbb{C}^{2^n} \quad (\text{A.28})$$

ist demnach ein separabler unendlich dimensionaler Hilbertraum, für den wir eine ONB in Besetzungszahlen angeben können:

$$\{|n_\alpha, n_\beta\rangle \mid n_\alpha, n_\beta \in \mathbb{N}_0\} \quad (\text{A.29})$$

Die den Basisvektoren zugeordneten Vernichtungsoperatoren bezeichnen wir kurz mit

$$a \equiv a_\alpha \text{ und } b \equiv a_\beta, \quad (\text{A.30})$$

welche wir somit als *Schwinger-Bosonen* definieren wollen. Der entsprechend physikalisch wichtige Unterraum wurde mit

$$U_s \equiv \{|n_\alpha, n_\beta\rangle \mid n_\alpha + n_\beta = 2s\} = \mathcal{P}_+ \mathcal{H}_{2s} \quad (\text{A.31})$$

bezeichnet und eine orthogonale Projektion auf diesen kann zum Beispiel mit

$$P_s \equiv \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} d\lambda e^{i\lambda(a^\dagger a + b^\dagger b - 2s)} \quad (\text{A.32})$$

gewählt werden.

Satz P_s definiert eine orthogonale Projektion auf U_s .

Beweis: P_s ist offensichtlich linear und wirkt auf ein Basiselement wie folgt:

$$P_s |n_\alpha, n_\beta\rangle = \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} d\lambda e^{i\lambda(n_\alpha + n_\beta - 2s)} |n_\alpha, n_\beta\rangle = \delta_{n_\alpha + n_\beta, 2s} |n_\alpha, n_\beta\rangle \quad (\text{A.33})$$

Damit ist der Operator idempotent, $P_s^2 = P_s$, und $U_s = \text{Bild}(P_s) = \text{Kern}(P_s)^\perp$. \square

Literaturverzeichnis

- [AUE] **A. Auerbach**
Interacting Electrons and Quantum Magnetism, Springer, New York 1994
- [BRO] **R. Brout**
Statistical Mechanical Theory of Ferromagnetism. High Density Behavior, Phys. Rev. 118, 1960
- [FEY] **R. P. Feynman, A. R. Hibbs**
Quantum Mechanics and Path Integrals, McGraw-Hill, New York 1965
- [GEO] **A. Georges, G. Kotliar, W. Krauth, M. Rozenberg**
Dynamical mean-field theory of strongly correlated fermion systems and the limit of infinite dimensions, Reviews of Modern Physics, Vol. 68, 1996
- [GOL] **K. H. Goldhorn, H. P. Heinz, M. Kraus**
Moderne mathematische Methoden der Physik II, Springer, Heidelberg 2010
- [GUS] **S. J. Gustafson, I. M. Sigal**
Mathematical Concepts of Quantum Mechanics, Springer, Heidelberg 2003
- [KLA] **J. R. Klauder, B. Skagerstam**
Coherent States, World Scientific, Singapore 1985
- [KLE] **H. Kleinert**
Pfadintegrale in der Quantenmechanik, Statistik und Polymerphysik, BI-Wissenschafts-Verlag, Mannheim 1993
- [MAT] **R. D. Mattuck**
A Guide to Feynman Diagrams in the Many-Body Problem, Mc Graw- Hill, NY 1976
- [MEY] **K. von Meyenn**
Quantenmechanik und Weimarer Republik, Vieweg, Wiesbaden 1994
- [NEG] **J. W. Negele, H. Orland**
Quantum Many-Particle Systems, Addison-Wesley, Redwood City 1988
- [NOL] **W. Nolting**
Grundkurs Theoretische Physik 7: Viel-Teilchen-Theorie, Springer, Berlin 2002
- [PEA] **P. A. Pearce, C. J Thompson**
The High Density Limit for Lattice Spin Models, Commun. Math. Phys. 58, 1978
- [ROE] **G. Roepstorff**
Pfadintegrale in der Quantenmechanik, Vieweg, Braunschweig 1991

- [RSI] **M. Reed, B. Simon**
Methods of Modern Mathematical Physics, Vol. 1, Academic Pr Inc, 1981
- [SCH] **L. R. Schulman**
Techniques and Applications of path Integration, Wiley, New York 2005
- [SWA] **F. Schwabl**
Quantenmechanik für Fortgeschrittene, Springer, Berlin 1997
- [THO] **C. J Thompson**
Ising model in the high density limit, Commun. Math. Phys. 36, 1974
- [VDO] **P. G. J. van Dongen**
Anwendung der Vielteilchentheorie in der Festkörperphysik, Vorlesung, Mainz 2000
- [VWA] **A. L. Fetter, J. D. Walecka**
Quantum Theory of Many-Particle Systems, Mc Graw-Hill, New York 1971
- [ZE1] **E. Zeidler**
Quantum Field Theory I - Basics in Mathematics and Physics, Springer, Berlin 2006
- [ZE2] **E. Zeidler**
Quantum Field Theory II - Quantum Electrodynamics, Springer, Berlin 2009
- [ZJU] **J. Zinn-Justin**
Pathintegrals in Quantum Mechanics, Oxford University Press, 2005

Erklärung

Ich versichere hiermit, diese Bachelorarbeit selbständig und nur unter Benutzung der angegebenen Literatur verfasst zu haben.

Mainz, den 16. Mai 2011

Julian Großmann