

Prom. Nr. 3337

Über ein zweidimensionales klassisches Konfigurationsmodell

Von der

EIDGENÖSSISCHEN TECHNISCHEN
HOCHSCHULE IN ZÜRICH

zur Erlangung der Würde eines Doktors
der Naturwissenschaften
genehmigte

PROMOTIONSARBEIT

vorgelegt von

FRANZ RYS
dipl. Phys. ETH
von Prag (CSR)

Referent: Prof. Dr. M. Fierz

Korreferent: Prof. Dr. R. Jost

Basel

Buchdruckerei Birkhäuser AG.

1963

Über ein zweidimensionales klassisches Konfigurationsmodell

1. Einleitung

In der Statistischen Mechanik ist es sehr nützlich, an Hand von Modellen das Phänomen der Phasenumwandlung zu untersuchen. Dazu sind zwei Voraussetzungen nötig: einmal sollen für das Modell die thermodynamischen Grössen als Funktion von äusseren Variablen, wie Temperatur, Druck, Magnetfeld usw., bestimmbar sein. Zweitens soll eine Phasenumwandlung auftreten.

Bis heute sind erst drei statistische Modelle bekannt, die diese beiden Voraussetzungen erfüllen: Das Bose-Einstein-Gas, das Sphärische Modell und das Ising-Modell des Ferromagnetismus bei Abwesenheit des äusseren Magnetfeldes (vgl. ¹⁾²⁾³⁾).

Das im folgenden behandelte Modell (F-Modell) ist ein Konfigurationsmodell auf einem quadratischen Gitter. Die Energie ist nur abhängig von der Konfiguration; es tritt kein dynamischer Term auf. Die Anzahl der möglichen Konfigurationen wird durch bestimmte Zwangsbedingungen eingeschränkt. Die Beschreibung des F-Modells erfolgt in Abschnitt 2. Das F-Modell weist eine grosse Ähnlichkeit mit dem Ising-Modell auf, die im Abschnitt 3 beschrieben wird. Daraus ergibt sich die Möglichkeit einer Tieftemperaturentwicklung (Abschnitt 4). Ferner lässt sich ganz analog zum Ising-Modell eine lange Reichweite der Ordnung für tiefe Temperaturen beweisen (Abschnitt 5). Es gelingt auch, eine Operatormethode zu entwickeln, die im Abschnitt 6 beschrieben wird. Es können einige allgemeine Aussagen über die Methode des grössten Eigenwertes des Operators gemacht werden; für endliche Streifenbreiten ($n = 2, 4$ und 6) wird ferner die exakte Lösung angegeben. Im Abschnitt 7 wird eine Näherungsmethode entwickelt, und im Abschnitt 8 werden einige Schlussfolgerungen gezogen.

2. Definition und Erläuterungen

Das F-Modell ist auf einem zweidimensionalen quadratischen Gitter (G) definiert. Dieses Gitter habe N Gitterpunkte (GP). Auf jedem Verbindungsstrich (Str) eines GP mit seinen 4 Nachbarn befindet sich ein Atom (A). A kann 2 bezüglich der Str -Mitte symmetrische Lagen einnehmen, sitzt also stets in der Nähe eines GP . Auf N GP entfallen $2N$ Str und damit $2N$ A 's, das heisst im Mittel gehören zu jedem GP 2 A 's. Die *Vorschrift* des Modells verlangt nun, dass genau 2 A 's in der Nähe jedes GP sitzen. Jeder GP bildet mit seinen beiden A 's zusammen eine GP -Anord-

*) Gegenwärtig: Institut de Physique, Université de Genève, Genève.

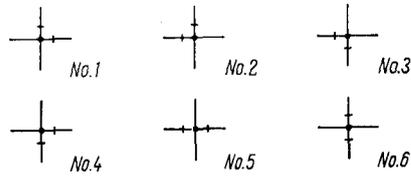


Fig. 1

nung. Betrachtet man einen *GP* für sich, so sind 6 verschiedene *GP*-Anordnungen möglich (vgl. Fig. 1).

Die Gesamtheit der Anordnungen aller N *GP* des Gitters bilden eine Gitterkonfiguration (Konf.). Die Anordnungen sind jedoch nicht unabhängig voneinander, denn jedes A trägt zu den Anordnungen beider *GP* bei, die der betreffende *Str* verbindet.

Ohne die Vorschrift, dass jedem *GP* genau 2 A 's benachbart sind, wäre die totale Anzahl verschiedener Konfigurationen gleich 2^{2N} . Diese Zahl wird nun durch die Vorschrift beträchtlich reduziert.

Jedem *GP* wird ferner eine Energie zugeordnet, die von der Anordnung abhängig ist, und zwar setzt man für:

Anordnung Nr. 1, 2, 3, 4	(Symbol 0)	die Energie ε_0 ,
Anordnung Nr. 5	(Symbol $-$)	die Energie ε_1 ,
Anordnung Nr. 6	(Symbol $+$)	die Energie ε_1 .

Die totale Energie einer Konfiguration setzt sich additiv aus den Energien der einzelnen *GP* zusammen:

$$E_{Konf} = \sum_{k=1}^N \varepsilon^{(k)} \quad (1)$$

(k : *GP*-Index).

Es tritt keine Wechselwirkungsenergie auf; dafür bestehen Zwangsbedingungen für die Konfigurationen.

Das Problem der statistischen Behandlung des Modells besteht nun in der Bestimmung der Zustandssumme

$$Z = \sum_{(Konf)} e^{-E_{Konf}/kT}. \quad (2)$$

Eine Gitterkonfiguration ist eindeutig gegeben durch die Grösse σ_j in jedem *GP* ($j = 1, 2, \dots, N$); σ_j kann die Werte 0, -1 und $+1$ annehmen und entspricht dem in Tabelle 1 eingeführten Symbol der Anordnung. Die Vorschrift lässt sich nun durch die σ_j ausdrücken. Längs einer jeden Zeile bzw. Kolonne dürfen auf ein $+1$ beliebig viele 0 und hierauf nur ein -1 folgen und umgekehrt. Die 0 ist gewissermassen durchsichtig.

Die totale Konfigurationsenergie lässt sich nun schreiben:

$$E = (N - S) \varepsilon_0 + S \varepsilon_1 = N \varepsilon_0 + (\varepsilon_1 - \varepsilon_0) S, \quad (3)$$

wobei

$$S = \sum_{j=1}^N |\sigma_j|. \quad (4)$$

Wir unterscheiden nun zwei Fälle:

a) $\varepsilon_0 > \varepsilon_1$. Der Zustand kleinster Energie (Grundzustand) ist durch $S = N$ gegeben. + und - wechseln längs jeder Zeile und Kolonne ab (+ - - Feld). Der erste angeregte Zustand besteht aus 4 quadratisch angeordneten 0 im + - - Feld. Die höher angeregten Zustände lassen sich systematisch angeben, ganz analog wie beim Ising-Modell. Dies führt zu einer Tieftemperaturentwicklung, die im Detail im Abschnitt 4 dargestellt ist. Der Entartungsgrad aller dieser Zustände beträgt 2.

b) $\varepsilon_0 < \varepsilon_1$. Der Grundzustand $S = 0$ besteht aus lauter 0 (0-Feld). Wie weiter unten ersichtlich sein wird, beträgt der Entartungsgrad $2^{m+n} = 4^{\sqrt{N}}$ (für $m = n$), schrumpft aber auf 1 zusammen, wenn nur eine Zeile und eine Kolonne durch lauter Vorzeichen besetzt ist. Die innere Struktur des Modells ist in diesem Fall durch den Rand wesentlich beeinflusst. Eine Tieftemperaturentwicklung ist nach dem Muster des Falles a) nicht möglich. Aus diesen Gründen werden wir diesen (pathologischen) Fall nicht weiter behandeln und uns auf den Fall a) beschränken.

Um uns von den unbequemen Randpunkten zu befreien, die in jedem endlichen ebenen Gitter auftreten, spannen wir G auf einen Torus auf. Dies bedeutet, dass jede Zeile und jede Kolonne in sich geschlossen wird. Dazu äquivalent ist ein anderes Verfahren: Man identifiziert in einem ebenen Gitter die 1. mit der $(m+1)$ -Zeile und die 1. mit der $(n+1)$ -Kolonne (Periodizitätsbedingung).

Nimmt man an, dass N sehr gross sei, so ist es sehr wahrscheinlich, dass in jeder Zeile und jeder Kolonne ein + (und daher auch ein -) vorhanden ist. Dann legen aber alle im Gitter vorhandenen 0 eindeutig die Anordnung fest. Die Zeile, die durch eine 0-Anordnung geht, legt nämlich durch das nächste längs dieser Zeile auftretende Vorzeichen die A 's auf beiden waagrechten *Str* der Anordnung eindeutig fest, und ebenso das Kolonnenvorzeichen die A 's auf den senkrechten *Str*.

Obige Annahme ist durch die grosse Zahl N gerechtfertigt. Die Anzahl der Vorzeichen des Gitters sei αN , wo α sehr klein aber endlich sei. Dann entfallen im Mittel $(\alpha/4)\sqrt{N}$ Vorzeichen auf jede der \sqrt{N} Zeilen und Kolonnen. Diese Zahl ist gross für grosse N , das heisst das Auftreten einer Zeile oder Kolonne mit lauter 0 ist beliebig unwahrscheinlich. Tritt eine solche doch auf, so ergibt dies bloss einen Faktor 2 in der Konfigurationsanzahl für jede 0-Zeile oder -Kolonne.

3. Die Graphenmethode. Vergleich mit dem Ising-Modell

Um eine systematische Charakterisierung der verschiedenen Zustände zu erhalten, verwenden wir zweckmässig passende Graphen. Diese Methode beruht wesentlich auf der Gültigkeit des folgenden Satzes.

Man zieht zunächst durch alle GP mit 0-Anordnung (von Quadratmitte zu Quadratmitte) einen zum Gitter G diagonal verlaufenden Strich, und zwar durch jene beiden Quadranten, auf deren Rand entweder beide zum GP gehörende A 's oder keine A 's sitzen (vgl. Fig. 2).

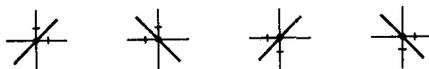


Fig. 2

Die Gesamtheit aller Diagonalstriche einer Konfiguration nennen wir einen Graphen. Dann folgt der Satz:

Jeder Graph besteht aus geschlossenen Linienzügen, die aus Diagonalstrichen bestehen. Zu jeder Konfiguration gehört ein Graph, während zu jedem Graphen 2 Konfigurationen gehören.

Zum Beweis betrachten wir ein elementares Gitterquadrat und numerieren die 4 A 's auf dem Quadratumfang. Die 16 möglichen Lagen lassen sich alle hinzeichnen und die Behauptung, dass niemals ein D -Str im Quadrat enden kann, im einzelnen verifizieren. Aus Symmetriegründen sind jedoch nur die 4 Möglichkeiten in Figur 3 wesentlich verschieden:

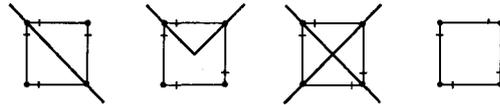


Fig. 3

Wir erhalten daraus die Aussage, dass in ein Quadrat 0, 2 oder 4 Str hineinragen können. Dies gilt für jedes Gitterquadrat, und daher gibt es keine Endpunkte der Linienzüge.

Diese geschlossenen Figuren befinden sich auf einem gegenüber dem ursprünglichen Gitter um 45° gedrehten Diagonalgitter (DG). Das DG besteht aus beiden Diagonalen aller Quadrate des ursprünglichen Gitters G .

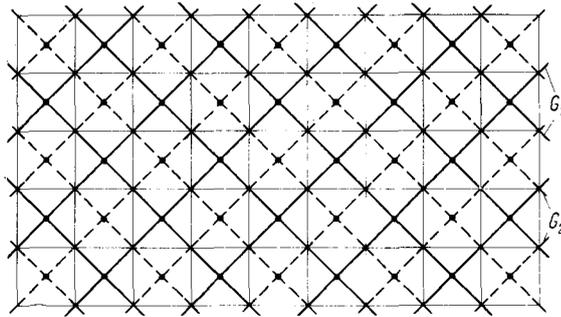


Fig. 4

Die Gitterpunkte des DG sind die Quadratmittelpunkte von G (Fig. 4). Wie ersichtlich, ist dieses DG ein quadratisches Doppelgitter; es besteht aus der Überlagerung eines einfachen quadratischen Gitters mit dessen dualem.

Formal ausgedrückt:

$$DG = G_1 \circ G_2. \quad (5)$$

Ein geschlossener Linienzug eines Graphen befindet sich ganz auf einem der beiden Übergitter G ; die Schnittpunkte der Gitterstriche von G_1 mit jenen von G_2 sind identisch mit den GP des Gitters G .

Da nun durch jeden GP kein oder nur ein Diagonalstrich gehen kann (einer, wenn die Anordnung dieses GP mit 0 bezeichnet ist), dürfen sich die Linienzüge auf G_1 nicht mit jenen auf G_2 schneiden. Dagegen können sich Linienzüge auf demselben Übergitter gegenseitig schneiden.

Betrachtet man die Tieftemperaturentwicklung des Ising-Modells, so lässt sich bekanntlich jede Gitterkonfiguration durch einen Graphen darstellen. Eine Ising-Konfiguration ist nämlich dann gegeben, wenn in jedem Gitterpunkt eines quadratischen Gitters der Spin angegeben wird (+1 oder -1). Rahmt man nun alle -1 = Spins ein, indem man jedes Paar benachbarter ungleicher Spins in der Mitte senkrecht durchschneidet, so ordnet man dadurch jeder Gitterkonfiguration einen Graphen in eindeutiger Weise zu, der nur aus geschlossenen Linienzügen besteht. Zum Unterschied zum F-Modell befindet sich ein Ising-Graph vollständig auf einem einfachen quadratischen Gitter.

Vergleicht man nun die Ising-Konfigurationen mit den F-Konfigurationen auf einem Gitter mit N GP , so sieht man, dass es offenbar weitaus mehr Ising- als F-Konfigurationen gibt. Das DG des F-Modells besteht aus G_1 und G_2 , welche je $N/2$ Gitterpunkte enthalten. Setzt man zum Vergleich beider Modelle G_1 und G_2 nebeneinander an und bildet so ein einfaches quadratisches Gitter mit N GP , so lassen sich die F-Graphen mit den Ising-Graphen vergleichen. Ein Ising-Graph kann aus allen möglichen Arten geschlossener Linienzüge aufgebaut sein, während ein F-Graph nur dann erlaubt ist, wenn sich entsprechende Linien auf G_1 und G_2 des Doppelgitters gegenseitig nicht schneiden.

Die Energie einer Konfiguration ist für beide Modelle gegeben durch die Länge l aller Linienzüge eines Graphen. Beim *Ising*-Modell sei die Energie so normiert, dass:

$$\left. \begin{aligned} \varepsilon(+ +) &= \varepsilon(- -) = 0, \\ \varepsilon(+ -) &= \varepsilon(- +) = \varepsilon. \end{aligned} \right\} \quad (6)$$

Jedem Paar ungleicher Nachbarn entspricht ein Strich mit Einheitslänge im Graph; daher ist die totale Konfigurationsenergie gegeben durch:

$$E_{Konf} = l \cdot \varepsilon. \quad (7)$$

Für das F-Modell sei:

$$\left. \begin{aligned} \varepsilon(0) &= \varepsilon, \\ \varepsilon(+ -) &= \varepsilon(- -) = 0. \end{aligned} \right\} \quad (8)$$

Jeder 0-Anordnung entspricht ein Strich im Graph; also ist auch hier:

$$E_{Konf} = l \cdot \varepsilon.$$

Die Zustandssumme lautet beim Ising-Modell:

a) $\varepsilon > 0$:

$$Z = \sum_{n=0}^{2N} g(n; N) x^n; \quad x = e^{-\varepsilon/kT}, \quad (9)$$

b) $\varepsilon < 0$:

$$\left. \begin{aligned} Z &= x^{-2N} \sum g(n; N) x^{2N-n}, \\ &= x^{-2N} \sum g(2N-n; N) x^n, \\ g(n, N) &= g(n); \quad x = e^{-|\varepsilon|/kT}. \end{aligned} \right\} (10)$$

Für das Ising-Modell ist wegen:

$$g(2N-n) = g(n), \quad (11)$$

also:

$$Z_{\text{b)}} = x^{-2N} Z_{\text{a)}}, \quad (12)$$

das heisst beide Zustandssummen unterscheiden sich nicht wesentlich, sondern nur bis auf eine additive Konstante in der Energie.

Für das F-Modell ist diese Beziehung zwischen den Fällen a) und b) *nicht* mehr gültig. Dies ist schon aus den beiden Grundzuständen ersichtlich. Der Grundzustand im Falle a) ist zweifach entartet und besteht aus alternierend verteilten + und -. Dagegen ist der Grundzustand im Falle b) hochgradig entartet. Der zugehörige Graph besteht aus einem Gewirr von geschlossenen Linienzügen, wobei durch jeden GP genau eine Diagonallinie hindurchgeht. Die Grundkonfiguration besteht aus lauter 0-Anordnungen. Für jede Zeile und jede Kolonne sind je 2 Möglichkeiten vorhanden, indem nämlich stets zu jeder Kette von Anordnungen längs einer Zeile eine zweite Kette gehört, die durch Vertauschen sämtlicher A's mit den Leerplätzen in der Zeile entsteht. Daher beträgt der Entartungsgrad:

$$2^{m+n} = 4^{\sqrt{N}} \quad (m = n) \quad (13)$$

für ein $m \cdot n$ -Gitter,

$$m \cdot n = N. \quad (14)$$

4. Tieftemperaturentwicklung

Aus der Ähnlichkeit des F-Modells mit dem Ising-Modell ergibt sich die Möglichkeit einer Tieftemperaturentwicklung. Der Entwicklungsparameter ist:

$$\left. \begin{aligned} x &= e^{-\varepsilon/kT}, \\ x(T=0) &= 0; \quad x(T=\infty) = 1. \end{aligned} \right\} (15)$$

Die Zustandssumme lautet:

$$Z = \sum e^{-E_{\text{Konf}}/kT}, \quad (2)$$

wobei über alle erlaubten Konfigurationen summiert wird.

Sie lässt sich auch schreiben:

$$Z = 2 \sum_{l=0}^N \sum_{(\Gamma_l)} e^{-E(\Gamma_l)/kT}. \quad (16)$$

(Γ_l) bedeutet, dass über alle erlaubten Graphen mit der Strichlänge l summiert wird.

Der Faktor 2 vor der Summe ist die Vielfachheit der Konfigurationen bezüglich eines Graphen und ist von l unabhängig. Im folgenden wird er weggelassen, da er keinerlei physikalische Bedeutung hat.

Für die Energie gilt:

$$E(\Gamma_l) = l \cdot \varepsilon, \tag{17}$$

das heisst, die additive Konstante der Energie wurde so gewählt, dass

$$\left. \begin{aligned} \varepsilon(+) = \varepsilon(-) = 0, \\ \varepsilon(0) = \varepsilon. \end{aligned} \right\} \tag{8}$$

Zudem wird der Fall

$$\varepsilon > 0 \tag{18}$$

angenommen. Daher ist:

$$Z = \sum_{l=0}^N g(l, N) x^l \tag{19}$$

mit den Bezeichnungen:

$$g(l, N) = \text{Anzahl } \Gamma_l \text{ im Gitter mit } N \text{ GP}.$$

Der tiefste angeregte Zustand ist offenbar durch ein Quadrat mit Einheitskantenlänge auf dem DG gegeben. G_1 und G_2 haben je $N/2$ GP, so dass es je $N/2$ Möglichkeiten für die Lage eines Quadrates gibt:

$$g(4, N) = 2 \cdot \frac{N}{2} = N. \tag{20}$$

Für den nächst höheren Zustand (Rechteck $2 \cdot 1$) ist:

$$g(6, N) = 2 N. \tag{21}$$

Diese beiden Anzahlen $g(4, N)$ und $g(6, N)$ stimmen mit den entsprechenden Werten des Ising-Modells überein, da die entsprechenden Graphen nur aus einem einzigen Linienzug bestehen und deshalb keine Überschneidungen auftreten. Erst für $l = 8$ tritt ein Unterschied auf; für einen Graphen kommen nun folgende Linienzüge in Frage:

$n = 8$

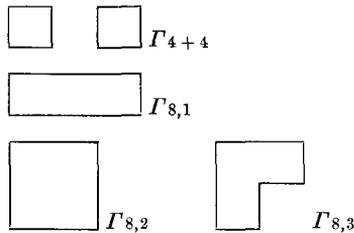


Fig. 5

Die Anzahlen dieser verschiedenen Graphen sind in Tabelle 2 angegeben.

Tabelle 2

g	Ising	F
$g(\Gamma_{8,1})$	$2 N$	$2 N$
$g(\Gamma_{8,2})$	N	N
$g(\Gamma_{8,3})$	$4 N$	$4 N$
$g(\Gamma_{4+4})$	$\frac{N(N-5)}{2}$	
$g(\Gamma_{4+4}); \Gamma_{4+4}$ ganz auf G_1 oder G_2		$\frac{N}{2} \left(\frac{N}{2} - 5 \right)$
$g(\Gamma_{4+4}); \Gamma_{4+4}$ auf G_1 und G_2		$\frac{N}{2} \left(\frac{N}{2} - 4 \right)$
Total	$\frac{N(N+9)}{2}$	$\frac{N(N+5)}{2}$

Für $l = 10, 12$ und 14 sind diese Anzahlen im Anhang dargestellt.

Diese Anzahlen ergeben die ersten Terme der Entwicklung der Zustandssumme nach x :

$$\left. \begin{aligned} Z_F = 1 + N x^4 + 2 N x^6 + \frac{N(N+5)}{2} x^8 + 2 N^2 x^{10} \\ + \frac{N}{6} (N^2 + 27 N - 82) x^{12} + N(N^2 + 5 N + 6) x^{14} + \dots \end{aligned} \right\} \quad (22)$$

Bildet man die Zustandssumme pro Teilchen, so hat man die N -te Wurzel aus Z_F zu ziehen. Dies ergibt:

$$A_F(x) = 1 + x^4 + 2 x^6 + 3 x^8 + 2 x^{10} - 9 x^{12} + 12 x^{14} \dots \quad (23)$$

Für das Ising-Modell ist (vgl. 4)):

$$A_{is}(x) = 1 + x^4 + 2 x^6 + 5 x^8 + 14 x^{10} + 44 x^{12} + 152 x^{14} \dots \quad (24)$$

Daraus lässt sich die Entwicklung der Energie und der spezifischen Wärme nach x berechnen. Bekanntlich ist:

$$E = k T^2 \left(\frac{d \log A}{dT} \right)_N = \varepsilon x \left(\frac{d \log A}{dx} \right)_N \quad (25)$$

$$\frac{C}{k} = \left(\frac{dE}{dT} \right)_N = (\log x)^2 \left(x^2 \frac{d^2 \log A}{dx^2} + x \frac{d \log A}{dx} \right) \quad (26)$$

Dies ergibt:

$$\frac{E}{\varepsilon} = 4 x^4 (1 + 3 x^2 + 5 x^4 - 41 x^8 + 21 x^{10} \dots) \quad (27)$$

und

$$\frac{C}{k} = 16 x^4 \left(1 + \frac{9}{2} x^2 + 10 x^4 - 123 x^8 + \frac{147}{2} x^{10} \dots \right) \quad (28)$$

5. Lange Reichweite der Ordnung

Für das Ising-Modell hat VAN DER WAERDEN⁵⁾ noch vor der exakten Behandlung durch ONSAGER⁶⁾ gezeigt, dass eine lange Reichweite der Ordnung für Mischkristalle (und daher auch für Ising-Ferromagnetika) existiert, falls die Temperatur genügend klein ist.

Dieser Satz lässt sich unmittelbar auf das F-Modell übertragen. Betrachtet man zum Beispiel ein Gitter von $10^8 \cdot 10^8$ GP (wie in ⁵⁾), so gilt zunächst der Satz 1:

Die Anzahl der möglichen Linienzüge mit der Länge l auf dem DG beträgt höchstens

$$\alpha_{N,l} = N \cdot 3^l. \quad (29)$$

Tatsächlich ist diese Anzahl wegen des Verbotes von Überschneidungen für das F-Modell noch kleiner als für das Ising-Modell. Daraus folgt aber a fortiori der Satz 2 (in ⁵⁾):

Die gesamte relative Wahrscheinlichkeit des Auftretens von Graphen aus Linienzügen mit der Länge $l < 40$ ist kleiner als der $2 \cdot 10^8$ -te Teil der relativen Wahrscheinlichkeit der Graphen, bei denen keine solchen Linienzüge vorkommen.

Dabei wurde für x der Wert $x = 1/12$ angenommen, um einen konkreten Fall vor Augen zu haben.

Zum Beweis gibt der Autor eine obere Schranke für die relative Wahrscheinlichkeit an:

$$\left. \begin{aligned} W_{rel}(l > 40) &< \sum_{\substack{(k_1, \dots, k_l) \\ \neq (0, \dots, 0)}} x^l \prod_i \frac{[N \cdot (3x)^{40+i} k_i]}{k_i!} x^{(40+i)k_i} \\ &= x^l (l^{4/3N} \cdot (3x)^{4l} - 1) \approx x^l \frac{1}{2 \cdot 10^8}. \end{aligned} \right\} (30)$$

Für das F-Modell ist diese Abschätzung ebenfalls richtig, da ja die $\alpha_{N,l}$ nach Satz 1 gegenüber dem Ising-Modell noch unterboten werden.

Im Anschluss an die bei VAN DER WAERDEN folgende Diskussion folgt auch für das F-Modell, dass für grosse N die Anzahl der gegenüber dem Grundzustand falsch besetzten Stellen sowie 0-Anordnungen verglichen mit N verschwindend klein ist. Dies gilt für alle Graphen, die mit nicht verschwindender Wahrscheinlichkeit auftreten.

Beim Ising-Modell kann man zudem eine Unordnung für hohe Temperaturen folgern. Es ist nämlich möglich, eine konvergente Hochtemperaturentwicklung anzugeben. Die lange (im Grenzfall unendlich lange) Reichweite der Ordnung bricht also bei einer kritischen Temperatur zusammen. Damit ist aber die Existenz mindestens eines Umwandlungspunktes gezeigt. Die Betrachtung über die lange Reichweite liefert zudem empirisch (nach VAN DER WAERDEN⁵⁾) einen guten Wert für den kritischen Punkt:

$$x_{c, is} \cong 0,46. \quad (31)$$

Der exakte Wert liegt bei:

$$x_{c, is} = 0,414 \dots = \sqrt{2} - 1. \quad (31')$$

Leider ist es für das F-Modell nicht möglich, eine analoge Überlegung anzustellen. Es ist nicht erwiesen, ob für hohe Temperaturen die lange Reichweite der Ordnung zusammenbricht oder ob sie wegen den herrschenden Zwangsbedingungen aufrecht erhalten bleibt. Für das F-Modell lässt sich daher auf diese Art nicht entscheiden, ob eine Umwandlung existiert.

6. Die Operatormethode

KRAMERS und WANNIER⁷⁾ (und unabhängig davon LASSETTRE und HOWE⁸⁾) gelang es zum ersten Mal, die Zustandssumme des Ising-Modells als grössten Eigenwert eines hermiteschen Operators auszudrücken. ONSAGER⁶⁾ löste hierauf das zwei-dimensionale Ising-Modell exakt. Für das F-Modell ist es gelungen, einen analogen Operator anzugeben, dessen grösster Eigenwert die Zustandssumme darstellt. Analog zum Ising-Modell spannt man das quadratische Gitter G auf einem Zylinder auf, wobei die Zeilen (mit je n GP) ringförmig angeordnet werden, während die Kolonnen axial verlaufen. In den GP sind die Anordnungen $+$, 0 und $-$ gemäss der Vorschrift des Modells angegeben. Der erste und der $(m + 1)$ -Zylinderring werden miteinander identifiziert, das heisst der Zylinder wird zu einem Torus geschlossen. Die Anzahl der GP sei wieder $N = m \cdot n$. Längs der Zylinderachse sei nach dem Zeilenring $z^{(l)}$ ($l = 1, 2, \dots, m$) einer Signatur $\sigma^{(l)}$ definiert als n -Tupel von Zahlen $s_j^{(l)}$ mit $s_j^{(l)} = \pm 1$ ($j = 1, 2, \dots, n$). Dabei gehört $s_j^{(l)}$ zur j -ten Kolonne und bezeichnet die erste GP-Anordnung $\neq 0$ längs dieser (j -ten) Kolonne auf den Zeilenringen $z_l, z_{l-1}, z_{l-2}, \dots$. Die 0 -Anordnungen werden also als durchsichtig betrachtet. Man nimmt nun an, dass der Zylinder bereits genügend lang ist (l sehr gross), damit in jeder Kolonne mindestens einmal ein GP-Symbol $\neq 0$ angetroffen wird.

Durch Angabe aller Signaturen $\sigma^{(l)}$ ($l = 1, 2, \dots, m$) ist eine Gitterkonfiguration vollständig gegeben. Das Paar von aufeinanderfolgenden Signaturen $\sigma^{(l)}$ und $\sigma^{(l+1)}$ bestimmt nämlich eindeutig die Anordnungen aller GP auf dem dazwischenliegenden Zeilenring z_l .

Die Zustandssumme lässt sich in der Form darstellen:

$$Z = \sum_{(Konf)} y^{e_1} y^{e_2} \dots y^{e_m} \quad (32)$$

mit:

$$y = e^{-\varepsilon(\pm) - \varepsilon(0)/kT} = \frac{1}{x}. \quad (32')$$

e_j ist die Anzahl von Anordnungssymbolen $\neq 0$ längs des Zeilenringes z_j ($j = 1, 2, \dots, m$). Die Summe erstreckt sich nur über alle erlaubten Gitterkonfigurationen. Z kann nun formal geschrieben werden:

$$Z = \sum_{\sigma^{(1)}, \dots, \sigma^{(m)}} (\sigma^{(1)} | H | \sigma^{(2)}) (\sigma^{(2)} | H | \sigma^{(3)}) \dots (\sigma^{(m)} | H | \sigma^{(1)}). \quad (33)$$

Dabei muss H die beiden Bedingungen erfüllen:

1. Es dürfen nur erlaubte Ringkonfigurationen auftreten. Dies bedeutet, dass auf einen Vorzeichenwechsel, zum Beispiel

$$s_k^{(j)} = +1 \rightarrow s_k^{(j+1)} = -1$$

(entsprechend dem Zeilensymbol $z_k^{(j)} = +1$), längs einer Zeile als nächster nur ein umgekehrter Vorzeichenwechsel folgen darf:

$$s_k^{(j)} = -1 \rightarrow s_k^{(j+1)} = +1$$

(was $z_k^{(j)} = -1$ entspricht). Bleibt ein Vorzeichen gleich:

$$s_k^{(j)} = s_k^{(j+1)},$$

so entspricht dies dem Zeilensymbol $z_k^{(j)} = 0$.

2. Ferner muss gelten:

$$(\sigma^{(j)} | H | \sigma^{(j+1)}) = y^{q_j} \quad (j = 1, 2, \dots, m).$$

Folgender symmetrischer Operator erfüllt 1. und 2.:

$$H = I + y^2 \sum_{\alpha < \beta} (P_\alpha Q_\beta - Q_\alpha P_\beta) + y^4 \left. \begin{aligned} & \sum_{\substack{\alpha_1 < \alpha_2 < \\ < \alpha_3 < \alpha_4}} (P_{\alpha_1} Q_{\alpha_2} P_{\alpha_3} Q_{\alpha_4} + Q_{\alpha_1} P_{\alpha_2} Q_{\alpha_3} P_{\alpha_4}) \\ & + \dots + y^n (P_1 Q_2 \dots Q_n + Q_1 P_2 \dots P_n). \end{aligned} \right\} \quad (34)$$

Der Einfachheit halber nimmt man n geradzahlig an: $n = 2 \nu$.

Dabei sind die Operatoren P_k und Q_k definiert als:

$$P_k \sigma(s_1, \dots, s_k, \dots, s_n) = \frac{1 + s_k}{2} \sigma(s_1, \dots, -s_k, \dots, s_n) \quad (35)$$

$$Q_k \sigma(s_1, \dots, s_k, \dots, s_n) = \frac{1 - s_k}{2} \sigma(s_1, \dots, -s_k, \dots, s_n). \quad (35')$$

Man sieht sofort, dass H der Bedingung 1) genügt; ferner ist die Anzahl der Vorzeichenwechsel, die ein Summand von H bewirkt, gerade gleich dem entsprechenden Exponenten von y ; das heisst auch 2) ist erfüllt.

P und Q werden dargestellt durch:

$$P = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}; \quad Q = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad (36)$$

das heisst die P_k und Q_k lassen sich darstellen als direkte Produkte:

$$\left. \begin{aligned} P_k &= I \times I \times \dots \times P \times \dots \times I, \\ Q_k &= I \times I \times \dots \times Q \times \dots \times I. \end{aligned} \right\} \quad (36')$$

Zu jedem Summand in H ist noch ein entsprechender hermitesch konjugierter Operator hinzuaddiert; weil zudem H reell ist, bedeutet dies, dass H *symmetrisch* ist. Daraus folgt, dass sämtliche Eigenwerte von H reell sind. Für die Zustandssumme ergibt sich daher:

$$Z = S \phi(H^m) = \sum_{i=1}^{2^n} \lambda_i^m. \quad (37)$$

Sei λ_1 der grösste Eigenwert von H . Dann ist:

$$Z = \lambda_1^m \cdot g_1 \left(1 + \sum \left(\frac{\lambda_n}{\lambda_1} \right)^m \right). \quad (37')$$

g_1 ist der Entartungsgrad von λ_1 ; das heisst $\lambda_k/\lambda_1 < 1$.

Im Limes $m \rightarrow \infty$ ergibt sich für die Zustandssumme A pro Teilchen:

$$A = \lim_{m \rightarrow \infty} Z^{1/m} = \lambda_1 \cdot \lim_{m \rightarrow \infty} g_1^{1/m}. \quad (37'')$$

Zur Bestimmung von Δ muss man also erstens den Entartungsgrad g_1 bzw.

$$\gamma = \lim_{m \rightarrow \infty} g_1^{1/m}$$

und zweitens den grössten Eigenwert λ_1 kennen.

Betrachtet man nun einen Vektor mit nicht negativen Koeffizienten in der Basis der σ im $V^{(2^n)}$ («nicht-negativer Vektor»), und wendet darauf den Operator H an, so entsteht wieder ein nicht-negativer Vektor, weil H nur nicht-negative Matrixelemente besitzt. Die Komponenten eines nicht-negativen Vektors können nun (als nicht-negative Zahlen) aufgefasst werden als Wahrscheinlichkeiten der statistischen Gesamtheit von Zuständen σ .

Nach dem fundamentalen Entwicklungssatz einer Matrix nach ihren Eigenwerten gilt:

$$(i | H | k) = \sum_{p=1}^{2^n} \lambda_p e_i^{(p)} e_k^{(p)}. \quad (38)$$

p numeriert alle Eigenwerte bzw. -vektoren. m -malige Anwendung von H ergibt:

$$(i | H^m | k) = \sum_{p=1}^{2^n} \lambda_p^m e_i^{(p)} e_k^{(p)}. \quad (38')$$

Für sehr grosse m wird schliesslich der ursprüngliche Vektor in den Eigenraum zu grösstem Eigenwert λ_1 projiziert, vorausgesetzt dass ersterer nicht orthogonal auf dem Eigenraum steht. Geht man zum Beispiel vom Vektor

$$e = \frac{1}{2^{n/2}} (1, 1, \dots, 1) = \frac{1}{2^{n/2}} \sum_{k=1}^{2^n} \sigma^{(k)} \quad (39)$$

aus, so ist er bestimmt nicht orthogonal zum Eigenraum zu λ_1 .

Folgender Satz von FROBENIUS⁹⁾ enthält einige allgemeine Aussagen über den grössten Eigenwert einer nicht-negativen Matrix:

Satz: Für eine Matrix A in n Dimensionen mit lauter nicht-negativen Elementen (nicht-negative Matrix) ist der grösste Eigenwert λ_1 stets nicht-negativ. λ_1 ist genau dann k -fach entartet, falls sämtliche Hauptminoren $(n-1)$ -, $(n-2)$ -, ..., $(n-k+1)$ -Grades der Matrix

$$A(\lambda) = A - \lambda E$$

verschwinden. $\lambda_1 = 0$ nur dann, falls sämtliche Ausdrücke von der Form $a_{\alpha\alpha}$, $a_{\alpha\beta} a_{\beta\alpha}$, ... verschwinden.

Für H folgt daraus wegen $h_{\alpha\alpha} = 1$:

$$\lambda_1 > 0. \quad (40)$$

Ferner gilt folgender

Satz: Zum grössten Eigenwert einer symmetrischen Matrix gibt es einen nicht-negativen Eigenvektor.

Beweis: Der grösste Eigenwert λ_1 ist gegeben durch

$$\lambda_1 = \sup_{\|x\|=1} x_i H_{ik} x_k \quad (> 0). \quad (41)$$

Sei nun ξ ein Eigenvektor zu λ_1 :

$$\lambda_1 = \xi_i H_{ik} \xi_k. \quad (41')$$

Dann ist auch η ($\eta_i = |\xi_i|$, $i = 1, 2, \dots, 2^n$) ein Eigenvektor zu λ_1 , denn aus:

$$|x_i H_{ik} x_k| \leq |x_i| |H_{ik}| |x_k|; \quad (H_{ik} \geq 0)$$

folgt:

$$\sup_{\|x\|=1} x_i H_{ik} x_k = \sup_{\|x\|=1} x_i H_{ik} x_i.$$

Daher ist:

$$\xi_i H_{ik} \xi_k = \eta_i H_{ik} \eta_k = \lambda_1. \quad (41'')$$

Die Komponenten des Vektors η können also als Wahrscheinlichkeiten aufgefasst werden.

Über H lassen sich ferner einige weitere spezielle Aussagen machen. Der Operator besitzt verschiedene Symmetrien, die aus der Definition leicht ersichtlich sind.

1. H kommutiert mit dem Operator T der Vorzeichensumme der Signaturen:

$$[H, T] = 0. \quad (42)$$

$$T \sigma(s_1, \dots, s_n) = t \cdot \sigma(s_1, \dots, s_n), \quad t = \sum_{i=1}^n s_i. \quad (42')$$

Die Eigenvektoren von T sind die Basisvektoren σ .

H lässt daher alle Unterräume \mathfrak{U}_t invariant, welche durch alle Basisvektoren mit dem festen Eigenwert t aufgespannt werden. t nimmt die $n+1$ -Werte an:

$$t = -n, \quad -n+2, \dots, -2, 0, 2, \dots, n-2, n.$$

Die Dimension A_t von \mathfrak{U}_t beträgt:

$$A_t = \binom{n}{\frac{n-t}{2}}. \quad (42'')$$

Falls der grösste Eigenwert von H nicht entartet ist, kann der zugehörige Eigenvektor nur in \mathfrak{U}_0 liegen, denn zu jedem Eigenvektor in \mathfrak{U}_t ($t \neq 0$) gehört ein zweiter in \mathfrak{U}_{-t} mit demselben Eigenwert.

2. H ist symmetrisch bezüglich der Gruppe D_n der Diederpermutationen der n Argumente s_k der Signaturen σ . D_n wird erzeugt durch die 2 Elemente A und B :

$$D_n = \{A \cdot B; \quad A^n = E, \quad B^2 = E, \quad B^{-1} A B = A^{-1}\}.$$

Die irreduzierten Darstellungen sind ein- und zweidimensional. Unter den eindimensionalen Darstellungen gibt es:

- a) die identische: $A = B = (1)$,
 b) ferner: $A = (1), \quad B = (-1)$.

Für geradzahliges n gibt es ferner die zwei weiteren eindimensionalen Darstellungen:

- c) $A = (-1), \quad B = (1)$,
 d) $A = (-1), \quad B = (-1)$.

Ferner gibt es (für n gerade) noch $m/2 - 1$ verschiedene zweidimensionale Darstellungen:

e)
$$A = \begin{pmatrix} \varepsilon & 0 \\ 0 & \varepsilon^{-1} \end{pmatrix}, \quad B = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix},$$

wobei ε eine primitive m -te Einheitswurzel ist.

D_n ist im Raum $V^{(2^n)}$ hochgradig reduzibel dargestellt und zerfällt in ein- und zweidimensionale irreduzible Bestandteile. Es gilt der

Satz: Vektoren, die zu inäquivalenten irreduziblen Darstellungen gehören, sind gegenseitig orthogonal.

Der oben eingeführte Vektor e (Gleichung (39)) gehört zur identischen Darstellung von D_n ; da aber der Eigenvektor η zum grössten Eigenwert λ_1 (Gleichung (41ⁿ)) nicht orthogonal auf e stehen kann, gehört er dem Unterraum zur identischen Darstellung an.

Weitere Aussagen über H lassen sich nur erhalten, wenn man die spezielle Form des Operators untersucht. Für tiefe Temperaturen und $\varepsilon > 0$ ist der grösste Eigenwert nicht entartet; der entsprechende Eigenvektor gehört dem Unterraum \mathfrak{U}_0 an. Um dies zu zeigen, entwickelt man H nach Potenzen von $x = e^{-(\varepsilon/kT)} = 1/y$:

$$x^n H = H^{(n)} + x^2 H^{(n-2)} + \dots + x^{n-2} H^{(2)} + H^{(0)}. \tag{34'}$$

Dabei ist:

$$H^{(n)} = P_1 Q_2 \dots P_{n-1} Q_n + h. c.,$$

$$H^{(n-2)} = \sum_{\alpha_1 < \dots < \alpha_{n-2}} P_{\alpha_1} Q_{\alpha_2} \dots P_{\alpha_{n-3}} Q_{\alpha_{n-2}} + h. c..$$

Nun entwickelt man auch den Eigenvektor und den Eigenwert nach Potenzen von x^2 und vergleicht die entsprechenden Koeffizienten der Eigenwertgleichung:

$$\left. \begin{aligned} (H^{(n)} + x^2 H^{(n-2)} + x^4 H^{(n-4)} + \dots) (v_0 + x^2 v_2 + x^4 v_4 \dots) \\ = (\lambda_0 + x^2 y_2 + x^4 \lambda_4 + \dots) (v_0 + x^2 v_2 + x^4 v_4 \dots). \end{aligned} \right\} \tag{43}$$

Dies ergibt zunächst:

$$H^{(n)} v_0 = \lambda_0 v_0. \tag{43'}$$

Man sieht leicht, dass folgende Eigenvektoren zu $H^{(n)}$ gehören:

$$\left. \begin{aligned} v_{01} &= \{ (+ - \dots + -) + (- + \dots - +) \}, \\ v_{02} &= \{ (+ - \dots + -) - (- + \dots - +) \}. \end{aligned} \right\} \tag{44}$$

Die entsprechenden Eigenwerte sind 1 (von v_{01}) und -1 (von v_{02}). Ferner gibt es noch alle übrigen Signaturen, welche Eigenvektoren von $H^{(n)}$ zum Eigenwert 0 sind. Für den grössten Eigenwert $\lambda(x)$ muss auch λ_0 maximal sein, das heisst:

$$\lambda_0 = 1 \quad \text{und} \quad v_0 = v_{01}, \tag{45}$$

offenbar ist:

$$T v_0 = 0, \quad \text{das heisst} \quad v_0 \in \mathfrak{U}_0. \tag{45'}$$

Daraus folgt aber bereits, dass wegen $[H, T] = 0$

$$v = v_0 + x^2 v_2 + \dots \in \mathfrak{U}_0 \tag{46}$$

in \mathfrak{U}_0 liegt und dass λ nicht entartet ist, solange die Reihenentwicklung nach x konvergiert, das heisst für tiefe Temperaturen (siehe unten). Es ist jedoch möglich, dass auch für hohe Temperaturen der Eigenvektor zum grössten Eigenwert nicht entartet ist. Ist dies jedoch nicht mehr der Fall, so wäre damit die Existenz eines (bzw. mindestens eines) Umwandlungspunktes gezeigt.

Aus dem Koeffizientenvergleich lassen sich ferner die ersten Glieder der Entwicklung der Zustandssumme angeben. Es ist:

$$x_0: H^{(n)} v_0 = \lambda_0 v_0 \rightarrow v_0 = v_{01}, \quad \lambda_0 = 1, \tag{43'}$$

$$x^2: H^{(n-2)} v_{01} + H^{(n)} v_2 = \lambda_2 v_{01} + v_2. \tag{43''}$$

Mit

$$v_2 = \alpha v_{01} + \beta v_{02} + \gamma v'_2, \tag{45}$$

wobei

$$(v'_2 v_{01}) = (v'_2 v_{02}) = (v_{01} v_{02}) = 0 \tag{45'}$$

ist, das heisst

$$H^{(n)} v_2 = \alpha v_{01} - \beta v_{02}. \tag{43''}$$

Ferner ist, formal ausgedrückt:

$$w = H^{(n-2)} v_{01} = \sum_{i=1}^n \left\{ \left(+ - + - \dots + + \overset{i}{\vdots} - - \dots + - + - \right) + h. c. \right\}, \tag{47}$$

daher

$$(w v_{01}) = (w v_{02}) = 0,$$

somit

$$\alpha v_{01} - \beta v_{02} + w = \alpha v_{01} + \beta v_{02} + v'_2 + \lambda_2 v_{01}.$$

Daraus folgt:

$$v_2 = \alpha v_{01} + w, \tag{43'''}$$

wobei

$$\alpha \text{ unbestimmt, } \lambda_2 = 0 \tag{48}$$

ist. (48) ist in Übereinstimmung mit der Tieftemperaturentwicklung nach der Graphenmethode (vgl. (22)).

Für den nächsten Koeffizienten ergibt sich:

$$x^4: H^{(n-4)} v_{01} + H^{(n-2)} (\alpha v_{01} + w) + H^{(n)} v_4 = \lambda_4 v_{01} + \lambda_0 v_4. \tag{43''''}$$

Daraus

$$\lambda_4 = \left. \begin{aligned} &(v_{01} | H^{(n-4)} | v_{01}) + \alpha (v_{01} | H^{(n-2)} | v_{01}) \\ &+ (v_{01} | H^{(n-2)} | w) + (v_{01} | H^n | v_4) - (v_{01} v_4). \end{aligned} \right\} \tag{49}$$

Die ersten beiden Summanden sind einzeln = 0; die letzten beiden addieren sich zu 0, und es ergibt sich:

$$\lambda_4 = (v_{01} | H^{(n-2)} | w) = \|w\|^2 = n. \tag{49'}$$

Die Entwicklung der Zustandssumme lautet daher:

$$Z = \lambda(x) = 1 + n x^4 + \dots, \quad (50)$$

was genau der Tieftemperaturentwicklung entspricht.

Für hohe Temperaturen lässt sich jedoch die Berechnung der Zustandssumme auf diese Art nicht durchführen.

Für endliche n ($n = 2, 4$ und 6) lassen sich die exakten Lösungen ohne grosse Mühe explizit berechnen.

Für den Fall $n = 2$ ergibt sich:

$$H = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & y^2 & 0 \\ 0 & y^2 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}. \quad (51)$$

Die Säkulargleichung lautet:

$$\det(H - \lambda E) \equiv (1 - \lambda)^2 [(1 - \lambda)^2 - y^4] = 0. \quad (52)$$

Sie hat die Lösungen:

$$\lambda_1 = 1 + y^2, \quad \lambda_2 = 1 - y^2; \quad \lambda_3 = \lambda_4 = 1. \quad (52')$$

Der grösste Eigenwert λ_1 ergibt die Zustandssumme pro Teilchen:

$$A(y) = \sqrt{1 + y^2}. \quad (52'')$$

Daraus ergibt sich die Energie und die spezifische Wärme:

$$\frac{E}{\varepsilon} = \frac{y^2}{1 + y^2}; \quad \frac{C}{k} = \left(\frac{\varepsilon}{k T}\right)^2 \frac{2 y}{(1 + y^2)^2}. \quad (53)$$

E und C bleiben stetig und glatt, so dass kein Umwandlungspunkt auftritt.

Für den Fall $n = 4$ sucht man nicht alle Eigenwerte von H zu bestimmen, sondern nützt die oben erwähnten Symmetrien aus. Man klassifiziert die Basisvektoren bezüglich der Eigenräume \mathfrak{U}_i des Operators T (vgl. Tabelle 3).

Tabelle 3

$\mathfrak{U}_4:$ $\begin{pmatrix} (+ + + +) \\ (+ + + -) \\ (+ + - +) \\ (+ - + +) \\ (- + + +) \end{pmatrix}$	$\mathfrak{U}_{-4}:$ $\begin{pmatrix} (- - - -) \\ (- - - +) \\ (- - + -) \\ (- + - -) \\ (+ - - -) \end{pmatrix}$
$\mathfrak{U}_2:$ $\begin{pmatrix} (+ + - -) \\ (- + + -) \\ (- - + +) \\ (+ - - +) \\ (+ - + -) \\ (- + - +) \end{pmatrix}$	$\mathfrak{U}_{-2}:$ $\begin{pmatrix} (+ + - -) \\ (- + + -) \\ (- - + +) \\ (+ - - +) \\ (+ - + -) \\ (- + - +) \end{pmatrix}$

Weiter benützt man die Tatsache, dass der grösste Eigenwert von H zum Eigenraum der identischen Darstellung der Diedergruppe gehört. Folgende 6 Vektoren spannen diesen Unterraum auf (vgl. Tabelle 4).

Tabelle 4

$w_4 = (+ + + +) \in \mathfrak{U}_4; \quad w_{-4} = (- - - -) \in \mathfrak{U}_{-4},$
$w_2 = \frac{1}{2} [(+ + + -) + (+ + - +) + (+ - + +) + (- + + +)] \in \mathfrak{U}_2,$
$w_{-2} = \frac{1}{2} [(- - - +) + (- - + -) + (- + - -) + (+ - - -)] \in \mathfrak{U}_{-2},$
$w_{01} = \frac{1}{2} [(+ + - -) + (- + + -) + (- - + +) + (+ - - +)] \in \mathfrak{U}_0,$
$w_{02} = \frac{1}{\sqrt{2}} [(+ - + -) + (- + - +)] \in \mathfrak{U}_0.$

Man sieht sofort, dass w_4, w_2, w_{-2} und w_{-4} Eigenvektoren von H sind. Die zugehörigen Eigenwerte lauten:

$$\lambda_4 = 1, \quad \lambda_2 = 1 + 3y^2, \quad \lambda_{-2} = 1 + 3y^2, \quad \lambda_{-4} = 1. \quad (54)$$

Im Unterraum, der durch w_{01} und w_{02} aufgespannt wird, hat H die Form:

$$H = \begin{pmatrix} 1 + 2y^2 & \sqrt{2}y^2 \\ 4\sqrt{2}y^2 & 1 + y^4 \end{pmatrix}. \quad (54')$$

Die Eigenwerte lauten:

$$\lambda_{\pm 1} = 1 + y^2 + \frac{y^4}{2} \pm \sqrt{9y^4 - y^6 + \frac{y^8}{2}}. \quad (54'')$$

Vergleicht man nun die 6 Eigenwerte miteinander, so ergibt sich der grösste:

$$\lambda_1 = 1 + y^2 + \frac{y^4}{2} + y^2 \sqrt{9 - y^2 + \frac{y^4}{2}}. \quad (54''')$$

Er ist nicht entartet und gehört zu \mathfrak{U}_0 (für alle Temperaturen).

Die Zustandssumme als Funktion von x lautet (mit verschobenem Energienullpunkt)

$$Z(x) = A^4(x) = 1 + 2x^2 + 2x^4 + \sqrt{1 - 4x^2 + 36x^4}. \quad (55)$$

Oder, nach Potenzen von x^2 entwickelt:

$$A(x) = 1 + \frac{9}{4}x^4 + 4x^6 + \dots \quad (55')$$

Es ist zu beachten, dass der Koeffizient von x^2 gleich 0 ist, was auch aus der exakten Tieftemperaturentwicklung folgt.

Für die Energie erhält man den Ausdruck

$$\frac{E}{\varepsilon} = 4 x^4 \left(1 + 2 x^2 + \frac{1 + 18 x^2}{\sqrt{1 - 4 x^2 + 36 x^4}} \right). \quad (56)$$

Nach x entwickelt:

$$\frac{E}{\varepsilon} = 4 x^4 (1 + 22 x^2 + 24 x^4 + \dots). \quad (56')$$

Für diesen Fall $n = 4$ sieht man also, dass der grösste Eigenwert nicht entartet ist und der zugehörige Eigenvektor in \mathcal{U}_0 liegt. Dies gilt für alle Temperaturen, das heisst für $0 \leq x \leq 1$.

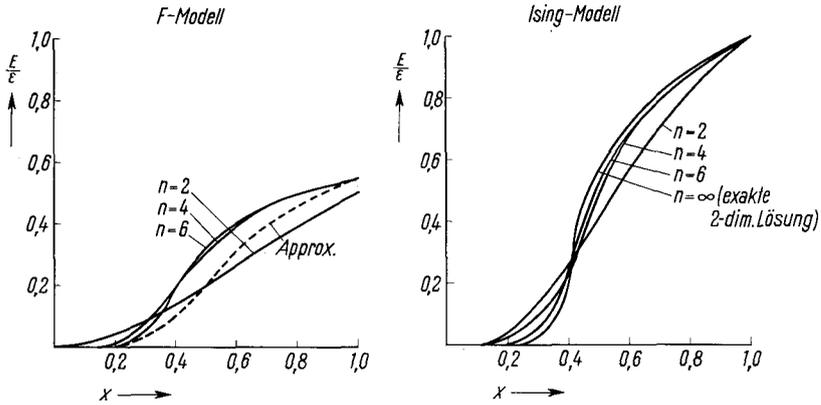


Fig. 6

Vergleich der Konfigurationsenergien des F-Modells und des Ising-Modells

Der Fall $n = 6$ führt auf die Lösung einer kubischen Gleichung. Der grösste zu \mathcal{U}_0 gehörige Eigenwert bzw. die sich daraus ergebende Energie als Funktion von x ist zusammen mit jener für $n = 2$ und $n = 4$ in Figur 6 dargestellt. Die Kurven zeigen nur ein geringes Anwachsen der maximalen Steigung für wachsendes n . Der Vergleich mit den Kurven für das Ising-Modell [$n = 2, 4$ und exakte Kurve ($n = \infty$)] ergibt ein Indiz dafür, dass die Steigung der Energie des F-Modells im Grenzfall $n = \infty$ endlich bleibt, dass also kein Umwandlungspunkt auftritt.

7. Eine Näherungsmethode

Auf Grund der in Abschnitt 3 gezeigten Ähnlichkeit des F-Modells mit dem zwei-dimensionalen Ising-Modell ergibt sich die Möglichkeit einer Näherungslösung für das F-Modell. Man betrachtet beide Modelle auf dem Doppelgitter des F-Modells, indem man das quadratische Gitter des Ising-Modells in 2 kongruente Teile G_1 und G_2 spaltet und diese dual aufeinander legt. Ein Ising-Graph besteht aus geschlossenen Linienzügen, die beliebig auf G_1 und G_2 liegen dürfen, während für einen F-Graphen die Vorschrift besteht, dass sich die Linienzüge auf G_1 nicht mit jenen auf G_2 schneiden. Diese Vorschrift lässt sich exakt für die Menge aller jener Graphen

formulieren, die aus einzelnen Strichen mit Einheitslänge bestehen («Dimere») und deren Gesamtlänge l gegeben ist («Dimer-Graph»).

Durch jeden der N Schnittpunkte der Übergitter G_1 und G_2 dürfen ohne Vorschrift 0, 1 oder 2 Dimere gehen, während nach Vorschrift nur 0 oder 1 Dimer gehen darf.

Die Anzahl Dimer-Graphen mit Gesamtlänge l beträgt für die beiden Fälle:

a) mit Vorschrift:

$$A_{012} = \sum_{l_i=0,1} \frac{l!}{\pi l_i!} = \frac{N!}{(N-l)!}, \quad (57)$$

b) ohne Vorschrift:

$$A_{01} = \sum_{l_i=0,1,2} \frac{l!}{\pi l_i!} = \sum_{z=0}^{[l/2]} \frac{N!}{z!(l-2z)!(N-l+z)!2^z}. \quad (58)$$

Für den Bruchteil

$$K(l, N) = \frac{A_{01}}{A_{012}} \quad (59)$$

ergibt sich:

$$\frac{1}{K} = F_{21} \left(-\frac{l}{2}, \quad \frac{1}{2} - \frac{l}{2}, \quad N - l + 1; 2 \right) \quad (60)$$

(siehe ERDÉLYI¹⁰).

Da kein geschlossener Ausdruck für $1/K$ existiert, verwendet man die Methode des grössten Summanden.

Dann ist

$$\frac{1}{K} = s(\bar{z}), \quad \text{wobei} \quad \left. \frac{ds(z)}{dz} \right|_{z=\bar{z}} = 0, \quad (61)$$

$$s(\bar{z}) = \left[\frac{\nu^\nu (1-\nu)^{(1-\nu)}}{(2\alpha)^\alpha (\nu-2\alpha)^{(\nu-2\alpha)} (1-\nu+\alpha)^{(1-\nu+\alpha)}} \right]^N; \quad \bar{z} = \alpha N. \quad (61')$$

Dies ergibt:

$$\alpha(\nu) = \frac{1}{2} \left(1 + \nu - \sqrt{1 + 2\nu - \nu^2} \right), \quad (61'')$$

also erhalten wir schliesslich

$$\frac{1}{K} \text{ als Funktion von: } \nu = \frac{E}{\varepsilon N}.$$

Die Ising-Konfigurationen der Länge l bilden eine Untermenge der Menge der Dimer-Graphen (der Gesamtlänge l). Man macht nun (im Sinne der Näherung) den Ansatz für die Anzahl $G_F(l, N)$ der F-Konfigurationen mit der Länge l :

$$G_F(l, N) = K(l, N) \cdot G(l, N), \quad (62)$$

$G(l, N)$: Anzahl der Ising-Konfigurationen.

Die mikrokanonische Konfigurationsentropie pro GP als Funktion der Energie ist gegeben durch:

$$s(l, N) = \frac{k}{N} \log g(l, N) = k \log \gamma(\nu), \quad (63)$$

wobei:

$$\nu = \frac{l}{N}, \quad l = \frac{E}{\varepsilon}, \quad \gamma = \sqrt[N]{\bar{g}}.$$

Der Ansatz der Näherung bedeutet also:

$$\frac{1}{k} s_F(l, N) = \log \gamma - \log \sigma \quad (62')$$

mit

$$\sigma = \sqrt[N]{\frac{1}{K}}.$$

Die Entropie des Ising-Modells ergibt sich bekanntlich aus der exakten Zustandssumme. Es ist

$$\log \gamma = \log A - \nu \log x, \quad (64)$$

$$\frac{d \log \gamma}{d \nu} = - \log x. \quad (64')$$

Aus (64) und (64') folgt

$$\nu = x \frac{d \log A}{d x}. \quad (64'')$$

Für das F-Modell ergibt sich die zu (64') analoge Gleichung:

$$\frac{d \log \gamma}{d \nu} - \frac{d \log \sigma}{d \nu} + \log x = 0. \quad (65)$$

Fasst man nun für beide Modelle x als Funktion der Energie ν auf, so lautet (65):

$$\log x_F(\nu) = \log x_{is}(\nu) - \frac{d \log \sigma(\nu)}{d \nu} \quad (65')$$

oder

$$x_F(\nu) = x_{is}(\nu) \cdot \frac{\nu}{1 - \nu} \cdot \frac{1 - \nu + \alpha(\nu)}{\nu - 2 \alpha(\nu)}. \quad (65'')$$

Die Energie des Ising-Modells ist bekanntlich eine monoton wachsende Funktion der Temperatur (also auch von x). Es ist:

$$\frac{d \nu}{d x} > 0, \quad \dots \quad \frac{d x(\nu)}{d \nu} > 0, \quad (66)$$

ausser am kritischen Punkt, wo

$$\frac{d \nu}{d x} = \infty \quad \dots \quad \frac{d x(\nu)}{d \nu} = 0. \quad (66')$$

Für das F-Modell ergibt sich im Sinne der Näherung:

$$\frac{d \log x_F}{d \nu} = \frac{d \log x_{is}}{d \nu} + \frac{d^2 \log \sigma}{d \nu^2}. \quad (67)$$

Da nun aber

$$\frac{d^2 \log \sigma}{d \nu^2} = \frac{d}{d \nu} \left[\frac{\nu}{1 - \nu} \cdot \frac{1 - \nu + \alpha(\nu)}{\nu - 2 \alpha(\nu)} \right] > 0 \quad (68)$$

für den ganzen Variationsbereich der F-Energie ist, so gilt für alle Temperaturen:

$$\frac{d x_F}{d \nu} > 0, \quad (69)$$

das heisst $d \nu / d x$ bleibt endlich. Damit tritt aber keine Singularität der spezifischen Wärme auf.

Die Reihenentwicklung der Näherung für kleine x ergibt für die Energie:

$$\frac{E_F^{(Approx)}}{\varepsilon} = 4 x^4 \left(1 + 3 x^2 + \frac{5}{4} x^4 - \frac{447}{16} x^6 \dots \right). \quad (70)$$

Die exakte Entwicklung lautet:

$$\frac{E_F}{\varepsilon} = 4 x^4 (1 + 3 x^2 + 5 x^4 - 41 x^6 \dots). \quad (70')$$

Ob diese Methode das F-Modell *im wesentlichen* richtig beschreibt, lässt sich nicht entscheiden. Jedenfalls wird die Funktion $g_F(l, N)$ für grosse l , das heisst $l \sim N$ vom richtigen Wert nur wenig abweichen; für tiefe Temperaturen ist hingegen die Abweichung grösser.

8. Schlussfolgerungen

Eine exakte Lösung, wie sie für die drei eingangs erwähnten Modelle gefunden werden konnte, lässt sich für das F-Modell nicht angeben. Auch die Frage nach dem Auftreten eines Umwandlungspunktes kann nicht endgültig beantwortet werden. Einige Hinweise deuten jedoch darauf hin, dass keine Phasenumwandlung auftritt. Die Konfigurationsenergie der Gitterstreifen mit Breite $n = 2, 4$ und 6 nähert sich, für wachsendes n , weniger rasch einer Kurve mit senkrechter Tangente, als dies beim Ising-Modell der Fall ist. Ferner ergibt sich aus dem vorgeschlagenen Näherungsverfahren, dass es zweifelhaft ist, ob die «richtige» Korrektur der Konfigurationsentropie für das F-Modell eine Umwandlung ergibt. Schliesslich ist die Vermutung, dass für hohe Temperaturen die weitreichende Ordnung zusammenbricht, durch *nichts* gerechtfertigt, und die Möglichkeit einer solchen Ordnung auf Grund der Natur der Zwangsbedingungen durchaus vorhanden.

Zum Schluss sei hier meinen beiden Lehrern, Prof. M. FIERZ und Prof. R. JOST, sowie den übrigen Mitgliedern des Seminars für theoretische Physik an der ETH, vor allem Herrn Dr. M. KUMMER, herzlichst für die hilfreichen Diskussionen gedankt.

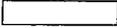
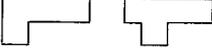
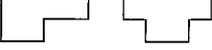
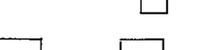
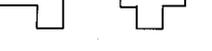
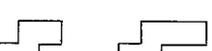
Literaturnachweis

- 1) R. BECKER, *Theorie der Wärme*, 2. Aufl. (Springer-Verlag, Berlin, Göttingen, Heidelberg, 1961). S. 174.
- 2) M. FIERZ, *Helv. Phys. Acta* 29, 47 (1956).
- 3) G. F. NEWELL and E. W. MONTROLL, *Rev. Mod. Phys.* 25, 354 (1953).
- 4) T. L. HILL, *Statistical Mechanics* (McGraw-Hill Book Co. Inc., 1956), S. 336.
- 5) B. L. VAN DER WAERDEN, *Z. Phys.* 118, 472 (1941).
- 6) L. ONSAGER, *Phys. Rev.* 65, 117 (1944); vgl. auch B. KAUFMAN, *Phys. Rev.* 76, 1232 (1949).
- 7) H. A. KRAMERS and O. H. WANNIER, *Phys. Rev.* 60, 252 (1941).
- 8) E. N. LASSETRE and J. P. HOWE, *J. Chem. Phys.* 9, 747 (1941).
- 9) S. B. FROBENIUS, *Sitzungsber. Berliner Akad. Wiss.* 1908, S. 471.
- 10) A. ERDÉLYI, *Higher Transcendental Functions* (McGraw-Hill Book Co. Inc., 1953); I, S. 89.
- 11) L. VAN HOVE, I. PRIGOGINE and L. MATHOT-SAROLEA, *Trans. Faraday Soc.* 48, 485 (1952).

Anhang

Tabelle einiger Graphen

l	Graph	$g_{ising}(l, N)$	$g_F(l, N)$
4		N	N
6		$2N$	$2N$
8		$\frac{N(N-5)}{2}$	$\frac{N(N-9)}{2}$
		$2N$	$2N$
		$4N$	$4N$
		N	N
	Total:	$\frac{N(N+9)}{2}$	$\frac{N(N+5)}{2}$
10		$2N(N-8)$	$2N(N-14)$
		$2N$	$2N$
		$4N$	$4N$
		$4N$	$4N$
		$8N$	$8N$
		$2N$	$2N$
		$8N$	$8N$
	Total:	$2N(N+6)$	$2N^2$
12		$\frac{N}{6}(N^2 - 15N + 62)$	$\frac{N}{6}(N^2 - 27N + 194)$
		$N(2N - 23)$	$2N(N - 20)$
		$2N(N - 11)$	$2N(N - 19)$
		$4N(N - 10)$	$4N(N - 18)$
		$N(N - 12)$	$N(N - 20)$

l	Graph	$g_{ising}(l, N)$	$g_F(l, N)$
12		$2 N$	
		$8 N; 8 N$	
		$2 N; 8 N$	
		$8 N; 4 N$	
		$N; 4 N$	
		$8 N; 4 N$	
		$4 N; 8 N$	
		$8 N; 4 N$	
		$4 N; 4 N$	
		$4 N; 8 N$	
		$4 N; 8 N$	
		$2 N; 4 N$	
		$4 N; N$	
	Total:	$124 N$	$124 N$
	Total: ($l = 12$):	$\frac{N}{6} (N^2 + 39 N + 224)$	$\frac{N}{6} (N^2 + 27 N - 82)$
	Differenz $g_i(12, N) - g_F(12, N) = \Delta_{12} = 2 N(N + 26)$		

$l = 14$: Analog: Differenz $g_i(14, N) - g_F(14, N) = \Delta_{14} = N(16 N + 124)$

Curriculum vitae

Am 23. Februar 1936 bin ich in Prag, CSR, geboren. Dort besuchte ich drei tschechische Volksschulklassen.

1946 übersiedelten wir in die Schweiz. In Arosa, GR, besuchte ich die Primar- und Sekundarschule bis 1951, hierauf in Chur und Schwyz die Mittelschule, die ich mit der Matura, Typ C, abschloss.

1958/59 diplomierte ich in Experimentalphysik bei Prof. SCHERRER. In der Folge wurde ich wissenschaftlicher Mitarbeiter am Physikalischen Institut der ETH, wo ich unter Anleitung von Prof. K. ALDER eine kleine Arbeit in theoretischer Kernphysik abschloss.

Seit 1960 bin ich Assistent für theoretische Physik bei Prof. M. FIERZ.