Unordnung im "free-fermion"-Fall des 8-Vertex-Modells

Christoph Richard
Universität Bonn
Physikalisches Institut
Nußallee 12
D-53115 Bonn
Germany

BONN-IB-95-26
Bonn University
April 1995

Zusammenfassung

The thermodynamical behaviour in a special case of the 8-vertex-model, the free-fermion-case, is considered in presence of 1D-impurities, following a study of Nieuwenhuizen and Orland on the 2D Ising-model. Layered quenched disorder is introduced in the case which belongs to the Onsager-class in the homogeneous case. The logarithmic singularity of the specific heat is weakened, the free energy is infinitely differentiable but nonanalytic at the critical point. In the case which represents the modified KDP-model the presence of deterministic disorder is studied; it is shown that the distribution of the impurities is completely irrelevant, leading to the same critical behaviour as in the homogeneous case.

Inhaltsverzeichnis

1 Einleitung **2**

2 Das inhomogene 8-Vertex-Modell **4**
2.1 Definition des Modells 4
2.2 Formulierung als Spinmodell 4

3 Formulierung des 8-Vertex-Modells mit Grassmannvariablen **8**
3.1 Abzählung der geschlossenen Graphen 8
3.2 Anwendung auf das 8-Vertex-Modell 11

4 Der „free-fermion“- Fall **13**
4.1 Der homogene Fall 13
4.2 Der inhomogene Fall: 1D-Unordnung 14

5 Der Isingfall **17**
5.1 Integralgleichung für die Freie Energie 17
5.2 Exakte Lösung des Modells 20
5.3 Kritisches Verhalten des Modells von Fan und Wu 24

6 Der KDP-Fall **29**
6.1 Exakte Lösung für deterministische Unordnung 29
6.2 Kritisches Verhalten 34
6.2.1 Homogener Fall 34
6.2.2 Inhomogener Fall 35

7 Zusammenfassung und Ausblick **37**

Danksagungen **38**

A Rechenregeln für Grassmannvariablen **39**

B Die Integralgleichung für das KDP-Modell **42**

Literaturverzeichnis **48**

Kapitel 1

Einleitung

Phasenübergänge in den üblichen Festkörpermodellen der Statistischen Mechanik (siehe z.B. [1]) sind durch Singularitäten in den zugehörigen physikalischen Größen wie der spezifischen Wärme oder der spontanen Magnetisierung ausgezeichnet.
McCoy und Wu [17, 18, 19] wiesen in den späten 60er Jahren mit Studien am 2D-Isingmodell darauf hin, daß Verunreinigungen des betrachteten Systems diese Singularitäten beseitigen können und so zu realistischeren Voraussagen über den Verlauf physikalischer Meßgrößen führen.
Obige Autoren betrachteten den Fall sogenannter „layered quenched disorder", in dem die vertikalen Kopplungen von Reihe zu Reihe unabhängig verteilte Zufallsvariablen sind, sich aber in einer Reihe wiederholen. In ihrem Modell ist die kritische Temperatur durch eine wesentliche Singularität in der Freien Energie gekennzeichnet.
Ein exaktes Ergebnis mit echter 2D-Unordnung im Isingmodell erhielten Dotsenko und Dotsenko 1983 [23] mit feldtheoretischen Methoden:
Im Grenzfall schwacher Unordnung wird die logarithmische Singularität in der spezifischen Wärme abgeschwächt in eine doppelt logarithmische.
Mit der Entdeckung von Quasikristallen sind in letzter Zeit verstärkt Untersuchungen an inhomogenen Systemen vorgenommen worden (siehe z.B. [24]).
Ein 1973 von Harris vorgeschlagenes Kriterium für die Relevanz von Unordnung auf das thermodynamische Verhalten eines Systems wurde von Luck 1993 [22] auf Systeme mit langreichweitig korrelierter Kopplungsverteilung verallgemeinert.
Nieuwenhuizen hat die von Dyson [9] eingeführte Methode zur Behandlung einer 1D-Kette gekoppelter Harmonischer Oszillatoren ab 1982 weiterentwickelt und auf eine Fülle von Problemstellungen angewandt, im Bereich der Statistischen Mechanik 1985 auf das 1D-Isingmodell und 1989 zusammen mit Orland auf das 2D-Isingmodell. Unter anderem reproduzierten sie in einer eleganten Rechnung das Ergebnis von McCoy und Wu [10, 11, 12, 13, 14].
In der vorliegenden Arbeit wird in Anlehnung an die Methoden von [14] der Einfluß von eindimensionaler Unordnung in einem Spezialfall des 8-Vertex-Modells untersucht, dem sog. „free-fermion-case" [2, 3]. Primär geht es dabei um den Fall, daß die Kopplungen unabhängige Zufallsvariable sind.
Im homogenen Fall [3] gibt es bei geeigneter Wahl der Kopplungen zwei qualitativ unterschiedliche Systeme:
Modelle mit Onsager-typischer logarithmischer Divergenz und sog. modifizierte KDP-Modelle (Kalium-Dihydrogen-Phosphat) mit Exponent $\frac{1}{2}$ in der spezifischen Wärme.
In Kapitel 2 wird zunächst das inhomogene 8-Vertex-Modell definiert. Dann wird untersucht, ob man es wie im homogenen Fall auch als Isingmodell mit Nächstnachbarwechselwirkung und zusätzlicher 4-Spinwechselwirkung beschreiben kann. Eine auf die folgende Betrachtung zugeschnittene Darstellung ist die in Kapitel 3 ausgeführte Formulierung mit Grassmannvariablen. Die verwendete Methode zur Berechnung der Freien Energie setzt voraus, daß sich die Zustandssumme als Determinante schreiben läßt; dies ist der „free-fermion"-Fall. In Kapitel 4 wird rechnerische Vorar-

beit geleistet, in Kapitel 5 wird der Onsager-Fall mit logarithmischer Divergenz in der spezifischen Wärme des homogenen Systems untersucht. Es zeigt sich qualitativ dasselbe Verhalten, das auch von McCoy und Wu beim Isingmodell gefunden wurde. Der KDP-Fall wird in Kapitel 6 abgehandelt: Im deterministischen Fall tritt gegenüber dem homogenen System keine qualitative Änderung ein; die Anordnung der Kopplungen ist beliebig.

Kapitel 2

Das inhomogene 8-Vertex-Modell

2.1 Definition des Modells

Gegeben ist ein $N \times M$ - Gitter. Die Kreuzungen heißen Vertices, die Verbindungen zwischen den Vertices heißen Linien. Versehe jede Linie mit einem Pfeil, so daß an jedem Vertex eine gerade Anzahl von Pfeilen einlaufen und auslaufen. Es gibt acht Möglichkeiten, die Pfeile an einem einzelnen Vertex anzuordnen, siehe Fig.1. Jeder Kombination wird eine Energie $e_j(n,m)$ (j=1...8) zugeordnet. Die Zustandssumme wird dann definiert als

$$Z = \sum_C \prod_{n,m} \exp[-e_c(n,m)/k_B T)]. \tag{2.1}$$

Es wird über alle erlaubten Konfigurationen C auf dem Gitter summiert, k_B ist die Boltzmannkonstante und T die Temperatur. $\omega_j(n,m)$ sind die Boltzmannfaktoren $\exp(-e_j(n,m)/k_B T)$; $e_c(n,m)$ ist die zum Boltzmannfaktor am Vertex (n,m) in der Konfiguration C gehörige Energie.

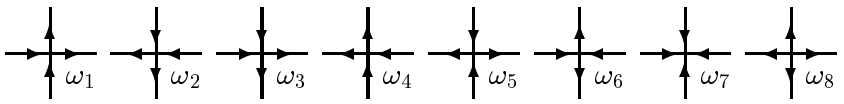


Fig.1

Das homogene 8-Vertex-Modell wurde 1970 von Fan und Wu [3] eingeführt.

2.2 Formulierung als Spinmodell

Es ist seit langem bekannt, daß das homogene 8-Vertexmodell zu einem Isingmodell mit Nächstnachbarwechselwirkung und zusätzlicher 4-Spin-Wechselwirkung äquivalent ist, siehe z.B. den Übersichtsartikel in [2]. Es wird nun untersucht, was sich im inhomogenen Fall ändert.

Diese Äquivalenz gilt im inhomogenen Fall nicht mehr, das 8-Vertex-Modell enthält lediglich als Spezialfall ein inhomogenes Isingmodell mit 2- und 4-Spinwechselwirkung.

Zunächst die Modellierung des Ising-Gitters:
Zu einem gegebenen quadratischen Gitter erhält man das sogenannte duale Gitter, indem man durch alle Linien Mittelsenkrechten zieht. Auf den Vertices des dualen Gitters sitzen Spinvariablen, die die Werte $+1$ oder -1 annehmen können.
Die Gitterkonfigurationen des 8-Vertexmodells werden wie folgt in Gitterkonfigurationen des Isingmodells übersetzt:
Gegeben ist eine Konfiguration des 8-Vertex-Modells. Eine dazugehörige Spinkonfiguration erhält man dadurch, daß man den Spinvariablen, die durch Pfeile nach rechts oder nach oben getrennt sind, unterschiedliches Vorzeichen gibt, und den Variablen, die durch Pfeile nach links oder nach

unten getrennt sind, dasselbe Vorzeichen gibt. Es gibt dann zu jeder Polygonkonfiguration genau zwei Spinkonfigurationen, die durch Spinumkehr ineinander übergehen.
Man definiert sich aus diesem Grund eine unter Spinumkehr invariante Zustandssumme:

$$\begin{aligned}\mathcal{H} = -\sum_{n,m} \quad & J_0(n,m) + J_1(n,m)\sigma_{n,m}\sigma_{n+1,m} + J_2(n,m)\sigma_{n,m}\sigma_{n,m+1} \\ & + J(n,m)\sigma_{n,m+1}\sigma_{n+1,m} + J'(n,m)\sigma_{n,m}\sigma_{n+1,m+1} \\ & + J_4(n,m)\sigma_{n,m}\sigma_{n,m+1}\sigma_{n+1,m+1}\sigma_{n+1,m}. \end{aligned} \tag{2.2}$$

Die Terme mit J_1 und J_2 sind horizontale und vertikale Nächstnachbarkopplungen, die Terme mit J und J' sind diagonale Nächstnachbarkopplungen, J_4 gibt die Stärke der Kopplung an, die durch die vier Spinvariablen um einen Vertex des Gitters des 8-Vertexmodells vermittelt werden (siehe auch Fig.4) .
Dies ist die allgemeinste Form mit 2- und 4-Spin-Wechselwirkung.

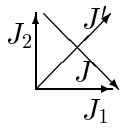


Fig.4

Es ergeben sich zwischen den Wechselwirkungen des Isingmodells und den Energien des 8-Vertex-Modells folgende Entsprechungen (siehe Fig.1):

$$\begin{aligned} e_1(n,m) &= (-J_0 + J_1 + J_2 - J - J' - J_4)(n,m), \\ e_2(n,m) &= (-J_0 - J_1 - J_2 - J - J' - J_4)(n,m), \\ e_3(n,m) &= (-J_0 - J_1 + J_2 + J + J' - J_4)(n,m), \\ e_4(n,m) &= (-J_0 + J_1 - J_2 + J + J' - J_4)(n,m), \\ e_5(n,m) &= (-J_0 + J_1 - J_2 + J - J' + J_4)(n,m), \\ e_6(n,m) &= (-J_0 - J_1 + J_2 + J - J' + J_4)(n,m), \\ e_7(n,m) &= (-J_0 + J_1 + J_2 - J + J' + J_4)(n,m), \\ e_8(n,m) &= (-J_0 - J_1 - J_2 - J + J' + J_4)(n,m). \end{aligned} \tag{2.3}$$

Wir besprechen zunächst die Eigenschaften der *homogenen* Modelle:
Das homogene Isingmodell hat sechs Parameter, das homogene 8-Vertex-Modell hingegen acht. Trotzdem sind beide Modelle äquivalent. Dieser scheinbare Widerspruch löst sich auf, indem man feststellt, daß in jedem Summand der Zustandssumme des 8-Vertex-Modells genausoviele ω_5 wie ω_6 und genausoviele ω_7 wie ω_8 auftreten.
(Dies läßt sich z.B. mit den Methoden aus dem folgenden Kapitel beweisen, indem man die Elementarzüge durchgeht und bemerkt, daß bei der Reduktion auf das Elementarquadrat die entsprechenden Terme nur paarweise verschwinden und zum Schluß tatsächlich gleichviele ω_5, ω_6 bzw. ω_7, ω_8 übrigbleiben.)
Man kann im homogenen Fall also annehmen:

$$\omega_5 = \omega_6, \qquad \omega_7 = \omega_8. \tag{2.4}$$

Man setzt dann:

$$e_5 = e_6 \quad = \quad -J_0 + J - J' + J_4, \tag{2.5}$$

$$e_7 = e_8 \quad = \quad -J_0 - J + J' + J_4.$$

Das verbleibende Gleichungssystem läßt sich eindeutig umkehren mit dem Ergebnis:

$$\begin{aligned}
J_0 &= -\frac{1}{4}(e_1 + e_2 + e_3 + e_4 + e_5 + e_6 + e_7 + e_8), \\
J_1 &= \frac{1}{4}(e_1 - e_2 - e_3 + e_4), \\
J_2 &= \frac{1}{4}(e_1 - e_2 + e_3 - e_4), \\
J &= \frac{1}{8}(-e_1 - e_2 + e_3 + e_4 + e_5 + e_6 - e_7 - e_8), \\
J' &= \frac{1}{8}(-e_1 - e_2 + e_3 + e_4 - e_5 - e_6 + e_7 + e_8), \\
J &= \frac{1}{8}(-e_1 - e_2 - e_3 - e_4 + e_5 + e_6 + e_7 + e_8). \qquad (2.6)
\end{aligned}$$

Um die sogenannte „free-fermion“-Bedingung

$$\omega_1\omega_2 + \omega_3\omega_4 - \omega_5\omega_6 - \omega_7\omega_8 = 0 \qquad (2.7)$$

(siehe nächstes Kapitel) für alle Temperaturen zu erfüllen, verlangt man

$$\{e_1 + e_2, e_3 + e_4\} = \{e_5 + e_6, e_7 + e_8\}. \qquad (2.8)$$

Wie man aus obigen Formeln erkennen kann, ist also im homogenen Modell der „free-fermion“- Fall für nichtverschwindende Kopplungen zu einem Isingmodell mit Nächstnachbarwechselwirkung auf einem Dreiecksgitter äquivalent.

Im *inhomogenen* Fall muß man, um das Gleichungssystem (2.3) umkehren zu können, entweder verlangen

$$J_1(n,m) = J_1(n',m'), \qquad J_2(n,m) = J_2(n',m') \qquad (2.9)$$

(dann ist man wieder im obigen Fall, siehe (2.5)), oder es muß gelten

$$e_1(n,m)+e_5(n,m) = e_2(n,m)+e_6(n,m), \qquad e_4(n,m)+e_7(n,m) = e_3(n,m)+e_8(n,m). \quad (2.10)$$

In diesem Fall ergibt sich

$$\begin{aligned}
J_4(n,m) &= -\frac{1}{4}(e_2 + e_4 - e_5 - e_8)(n,m), \\
J'(n,m) &= \frac{1}{4}(-e_2 + e_3 - e_6 + e_8)(n,m), \\
J(n,m) &= \frac{1}{4}(-e_2 + e_4 + e_5 - e_8)(n,m), \\
J_2(n,m) &= \frac{1}{4}(e_3 - e_4 - e_5 + e_6)(n,m), \\
J_1(n,m) &= \frac{1}{4}(e_1 - e_2 - e_3 + e_4)(n,m), \\
J_0(n,m) &= -\frac{1}{4}(e_1 + e_3 + e_5 + e_8)(n,m). \qquad (2.11)
\end{aligned}$$

Im „free-fermion-case“ ist jedoch auch dieser Spezialfall des inhomogenen 8-Vertex-Modells äquivalent zu einem inhomogenen Isingmodell mit Nächstnachbarwechselwirkung auf einem Dreiecksgitter:
Setzt man

$$(e_1 + e_2)(n,m) = (e_5 + e_6)(n,m), \qquad (e_3 + e_4)(n,m) = (e_7 + e_8)(n,m), \tag{2.12}$$

so folgt

$$\begin{aligned} e_1(n,m) = e_6(n,m), \quad & e_2(n,m) = e_5(n,m), \\ e_3(n,m) = e_7(n,m), \quad & e_4(n,m) = e_8(n,m). \end{aligned} \tag{2.13}$$

Dann gilt

$$J_4(n,m) = 0, \qquad J(n,m) = 0, \tag{2.14}$$

und es ist

$$\begin{aligned} J_0(n,m) &= -\frac{1}{4}(e_1 + e_2 + e_3 + e_4)(n,m), \\ J_1(n,m) &= \frac{1}{4}(e_1 - e_2 - e_3 + e_4)(n,m), \\ J_2(n,m) &= \frac{1}{4}(e_1 - e_2 + e_3 - e_4)(n,m), \\ J'(n,m) &= \frac{1}{4}(-e_1 - e_2 + e_3 + e_4)(n,m). \end{aligned} \tag{2.15}$$

Kapitel 3

Formulierung des 8-Vertex-Modells mit Grassmannvariablen

Dotsenko und Dotsenko [23] haben 1983 die Zustandssumme des Isingmodells mit Grassmannvariablen formuliert. Die Idee hierbei war, einen Ausdruck in Grassmannvariablen zu finden, der die geschlossenen Graphen auf einem quadratischen Gitter zählt, denn die Hochtemperaturentwicklung des Isingmodells ist gerade eine solche Summe über geschlossene Graphen.
Mit geringen Modifikationen ergibt diese Vorgehensweise einen Ausdruck für die Zustandssumme des inhomogenen 8-Vertex-Modells.
Im ersten Abschnitt wird der Ausdruck für die geschlossenen Graphen mit einer neuen Methode hergeleitet, im zweiten Abschnitt wird das Ergebnis auf das 8-Vertex-Modell angewandt.
Im folgenden wird, wenn nicht anders gesagt, immer von periodischen Randbedingungen ausgegangen.

3.1 Abzählung der geschlossenen Graphen

Beim 8-Vertex-Modell ordnet man jedem Vertex (n, m) 4 Grassmannvariablen $\psi_i(n, m)$ (i=1...4) zu.
Die Zustandssumme soll geschrieben werden als

$$Z = \int D\psi \exp \mathcal{L}(\psi), \text{ wobei} \tag{3.1}$$

$$D\psi := \prod_{n,m} D\psi(n, m), \qquad D\psi(n, m) := \prod_{i=1}^{4} d\psi_i(n, m),$$
$$\mathcal{L}(\psi) \text{ quadratische Form in } \psi_i(n, m).$$

Produkte von Grassmannvariablen sind in der Reihenfolge der Indizierung zu schreiben.

Zunächst wird folgende Behauptung bewiesen:
Der Ausdruck (3.1) mit

$$\begin{aligned}\mathcal{L}(\psi) = \sum_{n,m} &\psi_4(n, m)\psi_2(n, m + 1) + \psi_3(n, m)\psi_1(n + 1, m) \\ &+(\psi_1\psi_2 + \psi_3\psi_4 + \psi_1\psi_4 + \psi_2\psi_3 + \psi_4\psi_2 + \psi_3\psi_1)(n, m)\end{aligned} \tag{3.2}$$

zählt alle geschlossenen Graphen auf dem entsprechenden Gitter, bei denen jede Linie nur einmal durchlaufen wird.

Der Beweis wird in zwei Schritten geführt: Zunächst wird gezeigt, daß jeder Summand in (3.1) einen *geschlossenen* Weg repräsentiert, dann wird gezeigt, daß jeder Summand gerade +1 ist.

1.Schritt

Die Exponentialfunktion erzeugt alle Monome, die dadurch entstehen, daß man aus $\mathcal{L}(\psi)$ beliebig viele Summanden multipliziert, denn quadratische Ausdrücke in Grassmannvariablen kommutieren, und es gilt $\exp(\psi_1\psi_2) = 1 + \psi_1\psi_2$.
Bei der Integration bleiben nur Terme übrig, die alle 4NM Grassmannvariablen enthalten.
Um zu erkennen, welche das sind, ordnet man dem Term $\psi_4(n,m)\psi_2(n,m+1)$ eine vertikale Linie von (n,m) nach $(n,m+1)$ zu und dem Term $\psi_3(n,m)\psi_1(n+1,m)$ eine horizontale Linie von (n,m) nach $(n+1,m)$.
Es ergeben sich geschlossene Wege: Angenommen, dies wäre nicht so, dann gäbe es ein freies Ende (n,m), an dem noch eine *ungerade* Anzahl von Grassmannvariablen fehlt, damit der Vertex alle 4 Variablen enthält. Die zweite Zeile des Ausdrucks (3.2) liefert aber immer eine *gerade* Anzahl von Grassmannvariablen.
Entlang des Weges gibt es jeweils nur noch eine Möglichkeit, die Vertices mit 4 Variablen zu besetzen.
Für die Vertices, durch die kein Weg verläuft, gibt es drei Möglichkeiten: $\psi_1\psi_2\psi_3\psi_4$, $\psi_1\psi_4\psi_2\psi_3$ und $\psi_4\psi_2\psi_3\psi_1$. Zwei davon kompensieren sich jedoch wegen ihres Vorzeichens, so daß tatsächlich jeder geschlossene Weg genau durch einen Summanden repräsentiert wird.

2.Schritt

Vorbemerkung: Man möchte das Gesamtvorzeichen als Produkt der Vorzeichen schreiben, die bei der Integration über die einzelnen Vertices auftreten. Da aber im Ausdruck (3.2) die Variablen noch nicht nach ihrem Vertexplatz geordnet sind, muß man dies zuerst tun und den entsprechenden Umordnungsfaktor berücksichtigen.
Zunächst wird ein allgemeineres $\mathcal{L}(\psi)$ als in (3.2) betrachtet:

$$\begin{aligned}\mathcal{L}(\psi) = \textstyle\sum_{n,m} \alpha\psi_4(n,m)\psi_2(n,m+1) + \beta\psi_3(n,m)\psi_1(n+1,m)\\ +(a\psi_1\psi_2 + b\psi_3\psi_4 + c\psi_1\psi_4 + d\psi_2\psi_3 + e\psi_4\psi_2 + f\psi_3\psi_1)(n,m)\\ +k\psi_1\psi_2\psi_3\psi_4(n,m).\end{aligned} \tag{3.3}$$

Es werden Elementarbewegungen angegeben, die jeden geschlossenen Weg in ein Einheitsquadrat überführen, und die Konstanten werden dann so gewählt, daß keine Elementarbewegung den Vorfaktor ändert.
Betrachte zunächst die Vertices, durch die kein Weg verläuft:
Die Umordnung liefert kein zusätzliches Vorzeichen. Jeder Vertex erhält den Faktor $(ab+cd-ef+k)$, welcher 1 sein soll. Für die weitere Überlegung spielen dann nur noch die Vertices auf den Wegen eine Rolle.
Versehe jede Zusammenhangskomponente mit einer Orientierung, schreibe die quadratischen Ausdrücke in Grassmannvariablen in der Reihenfolge ihres Auftretens nebeneinander und stelle dann alle Variablen so, daß Variablen vom selben Vertex nebeneinander stehen, und zwar nach folgender Vorschrift: Vertausche die Variablen in den quadratischen Ausdrücken, die in der falschen Reihenfolge stehen und ziehe die letzte Variable nach vorn. Ist N die Länge der Zusammenhangskomponente, so ergibt sich ein Faktor $(-1)^{\frac{N}{2}+1}$. Als Beispiel betrachte Fig.2:

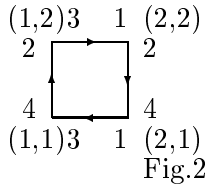


Fig.2

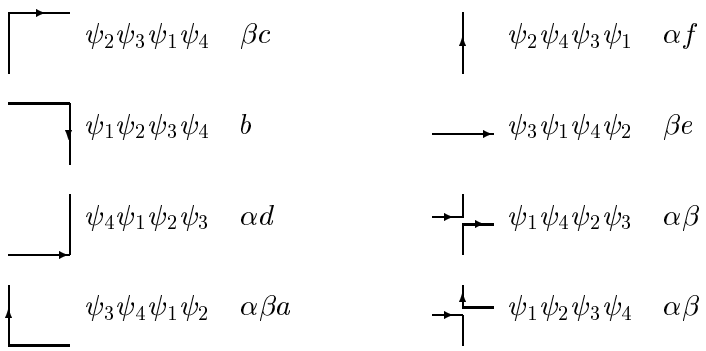
Die ursprüngliche Reihenfolge der Variablen ist

$$\psi_4(1,1)\psi_2(1,2)\psi_3(1,2)\psi_1(2,2)\psi_4(2,1)\psi_2(2,2)\psi_3(1,1)\psi_1(2,1).$$

Es müssen *zwei* Vertauschungen vorgenommen werden und die letzte Variable an den Anfang gebracht werden.
Nach dem Umordnen haben wir:

$$\psi_3(1,1)\psi_4(1,1)\psi_2(1,2)\psi_3(1,2)\psi_1(2,2)\psi_2(2,2)\psi_4(2,1)\psi_1(2,1).$$

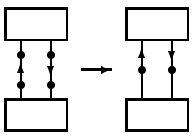
Ordnet man α der Variable ψ_4 und β der Variable ψ_3 zu, so ergeben sich nach Integration über den Vertex folgende Faktoren für die jeweiligen Wegstücke zusätzlich zu dem Umordnungsfaktor:

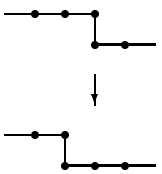


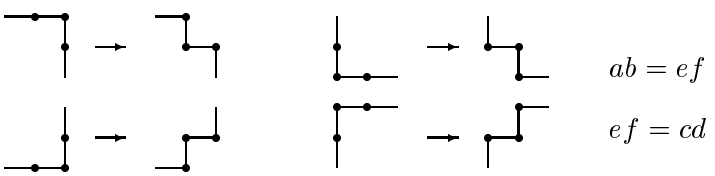
Pfeilumkehr ergibt ein zusätzliches Minuszeichen im entsprechenden Faktor, weil dann zwei Variablen vertauscht werden.

Reduktion durch Elementarzüge

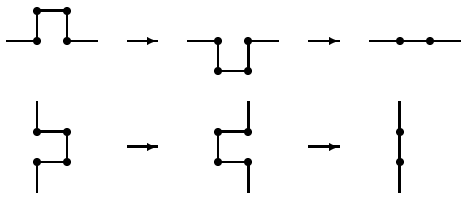
Eine Zusammenhangskomponente kann, wie man sich leicht klarmacht, durch folgende Elementarzüge auf das Einheitsquadrat reduziert werden:

Zug I  und horizontal $(\alpha f)^2 = (\beta e)^2 = 1$

Zug II  und vertikal

Zug III 

Zug IV

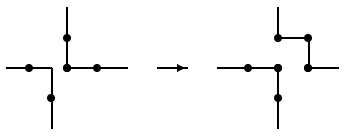


$abcd\alpha^2\beta^2 = \beta^2 e^2 = \alpha^2 f^2$

Die Forderung, daß sich der Vorfaktor bei der Wegverzerrung nicht ändert, führt gerade auf die nebenstehenden Gleichungen.
Betrachte als Beispiel Zug I: Bezeichnet man den Beitrag der Boxen mit G und ist N die Länge der Komponente vor dem Zug, so muß gelten:

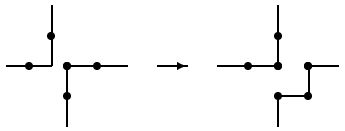
$$(-1)^{\frac{N}{2}+1}(\alpha f)(-\alpha f)G = (-1)^{\frac{N-2}{2}+1}G.$$

Nun wird der Fall mehrerer Zusammenhangskomponenten betrachtet, indem er auf den Fall einer einzigen zurückgeführt wird:
Mache in einem ersten Schritt das Gitter doppelt so fein! Dies ändert nicht die Zustandssumme: Die Vertices, durch die kein Weg verläuft, sind nach Konstruktion +1, und die hinzugekommenen Vertexpunkte auf den Wegen können durch I-Züge rückgängig gemacht werden.
In einem letzten Elementarzug schneidet man die Linie auf. (Die Gitterverdopplung mußte gemacht werden, damit das geht.)



$ef = a^2 b^2$

Zug V



$ef = c^2 d^2$

Dadurch hat man den Graphen in seine Zusammenhangskomponenten aufgelöst, von denen man schon weiß, daß sie dasselbe Vorzeichen wie das Einheitsquadrat haben. Sammelt man das Bisherige, so ergeben sich an die Konstanten folgende Einschränkungen:

$$\begin{aligned} 1 = ab &= cd = ef, \\ \alpha^2 &= e^2, \\ \beta^2 &= f^2. \end{aligned} \tag{3.4}$$

Daraus folgt insbesondere, daß das Einheitsquadrat und der leere Vertex den Faktor +1 erhalten. Setzt man nun

$$a = b = c = d = e = f = \alpha = \beta = 1,$$

so erhält man damit das behauptete Ergebnis.

3.2 Anwendung auf das 8-Vertex-Modell

In diesem Abschnitt wird die Zustandssumme des inhomogenen 8-Vertex-Modells mit Grassmannvariablen formuliert. Zunächst das Ergebnis:

Die Zustandssumme des inhomogenen 8-Vertex-Modells lautet:

$$Z = \int D\psi \exp \mathcal{L}(\psi),$$
$$D\psi := \prod_{n,m} D\psi(n,m), \quad D\psi(n,m) := \prod_{i=1}^{4} d\psi_i(n,m),$$

$$\begin{aligned}\mathcal{L}(\psi) = \sum_{n,m} &\psi_4(n,m)\psi_2(n,m+1) + \omega_1(n,m)\psi_3(n,m)\psi_1(n+1,m) \\ +(\omega_8/\omega_1\psi_1\psi_2 &+ \omega_7\psi_3\psi_4 + \omega_5/\omega_1\psi_1\psi_4 + \omega_6\psi_2\psi_3 + \omega_3/\omega_1\psi_4\psi_2 + \omega_4\psi_3\psi_1)(n,m) \\ &+1/\omega_1(\omega_1\omega_2 + \omega_3\omega_4 - \omega_5\omega_6 - \omega_7\omega_8)\psi_1\psi_2\psi_3\psi_4(n,m). \end{aligned} \tag{3.5}$$

Beachte hierbei, daß die ω_i explizit von n, m abhängen.

Zum Beweis schreibt man $\mathcal{L}(\psi)$ wieder in der allgemeineren Form (3.2), wobei nun aber die Konstanten vom Vertex abhängen können:

$$\begin{aligned}\mathcal{L}(\psi) \quad = \quad &\sum_{n,m} a(n,m)\psi_4(n,m)\psi_2(n,m+1) + b(n,m)\psi_3(n,m)\psi_1(n+1,m) \\ &+(c\psi_1\psi_2 + d\psi_3\psi_4 + e\psi_1\psi_4 + f\psi_2\psi_3 + g\psi_4\psi_2 + h\psi_3\psi_1)(n,m) \\ &+k\psi_1\psi_2\psi_3\psi_4(n,m). \end{aligned} \tag{3.6}$$

Als nächstes bemerkt man, daß die Zustandssumme des 8-Vertex-Modells eine Summe über alle geschlossenen Wege auf dem Gitter ist: Identifiziere einen Pfeil nach rechts oder nach oben mit einer dicken Linie, einen Pfeil nach links oder nach unten mit einer dünnen Linie.
Die Konstanten müssen nun mit Hilfe der Formeln auf Seite 10 so angepaßt werden, daß sich die jeweiligen Boltzmannfaktoren ergeben, siehe Fig.3.

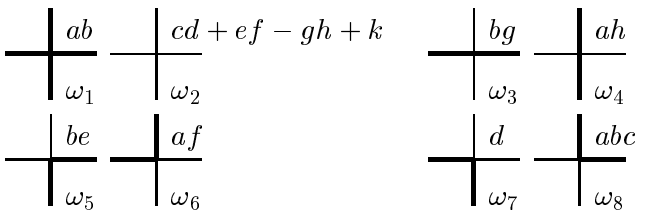


Fig.3

Gibt man a beliebig vor, so liegen alle anderen Konstanten fest:

$$\begin{aligned} b &= \frac{\omega_1}{a}, & f &= \frac{\omega_6}{a}, \\ c &= \frac{\omega_8}{\omega_1}, & g &= \frac{\omega_3}{\omega_1}a, \\ d &= \omega_7, & h &= \frac{\omega_4}{a}, \\ e &= \frac{\omega_5}{\omega_1}a, & k &= \omega_2 + \frac{\omega_3\omega_4}{\omega_1} - \frac{\omega_5\omega_6}{\omega_1} - \frac{\omega_7\omega_8}{\omega_1}. \end{aligned} \tag{3.7}$$

Wählt man nun $a = 1$, so erhält man obiges Ergebnis.

Kapitel 4

Der „free-fermion“- Fall

Im folgenden wird der „free-fermion-case“ des 8-Vertex-Modells behandelt: Die Bedingung

$$\omega_1\omega_2 + \omega_3\omega_4 - \omega_5\omega_6 - \omega_7\omega_8 = 0 \tag{4.1}$$

macht aus der Lagrangedichte eine quadratische Form in Grassmannvariablen, die einfach eine Determinante darstellt.
Die Forderung (4.1), unter der die Zustandssummme des homogenen 8-Vertex-Modells in geschlossener Form ausgewertet werden kann, wurde zuerst in [8] angegeben. In der sogenannten S-Matrix-Formulierung des 8-Vertex-Modells [8] ist diese Bedingung äquivalent zur Betrachtung eines nichtwechselwirkenden Viel-Fermion-Systems [4]. Dies rechtfertigt die Bezeichnung „free-fermion“-Bedingung, vergleiche auch den feldtheoretischen Ansatz in [23]. Im folgenden wird der „free-fermion“-Fall auch „Modell von Fan und Wu“ genannt.
Die in diesem Kapitel benutzten Bezeichnungen und Rechenregeln für Grassmannvariablen sind im Anhang A erläutert.

4.1 Der homogene Fall

Zunächst wird das Ergebnis von Fan und Wu [3], der homogene Fall, hergeleitet. Wir betrachten den Fall periodischer Randbedingungen. Dazu macht man eine zweidimensionale diskrete Fouriertransformation, so daß die Integrationen über die verschiedenen Vertices entkoppeln. Im thermodynamischen Limes ist die Zustandssumme dann ein Doppelintegral über eine 4×4-Determinante.

Setzen wir nun eine 2-dimensionale Fouriertransformation an:

$$\psi_i(\phi,\theta) = \frac{1}{\sqrt{NM}} \sum_{n,m} \psi_i(n,m) e^{\imath n\phi} e^{\imath m\theta},$$

so ergibt sich für die Zustandssumme bei geradem N:

$$\begin{gathered} Z = \int D\psi^* D\psi \exp \mathcal{L}(\psi^*,\psi), \\ D\psi = \textstyle\prod_{\phi,\theta>0} D\psi(\phi,\theta), \quad D\psi(\phi,\theta) = \prod_{i=1}^{4} d\psi_i(\phi,\theta), \\ \psi^*(\phi,\theta) = \psi(-\phi,-\theta), \end{gathered} \tag{4.2}$$

$$\begin{aligned} \mathcal{L}(\psi^*,\psi) = {} & \textstyle\sum_{\phi,\theta>0} (e^{-\imath\theta}\psi_4^*\psi_2 - e^{\imath\theta}\psi_2^*\psi_4) + \omega_1(e^{-\imath\phi}\psi_3^*\psi_1 - e^{\imath\phi}\psi_1^*\psi_3) \\ & + \tfrac{\omega_8}{\omega_1}(\psi_1^*\psi_2 - \psi_2^*\psi_1) + \omega_7(\psi_3^*\psi_4 - \psi_4^*\psi_3) + \tfrac{\omega_5}{\omega_1}(\psi_1^*\psi_4 - \psi_4^*\psi_1) \\ & + \omega_6(\psi_2^*\psi_3 - \psi_3^*\psi_2) + \tfrac{\omega_3}{\omega_1}(\psi_4^*\psi_2 - \psi_2^*\psi_4) + \omega_4(\psi_3^*\psi_1 - \psi_1^*\psi_3). \end{aligned} \tag{4.3}$$

Das ist für festes ϕ, θ nichts weiter als eine Determinante D:

$$\begin{vmatrix} 0 & \frac{\omega_8}{\omega_1} & -\omega_1 e^{-\imath\phi} - \omega_4 & \frac{\omega_5}{\omega_1} \\ -\frac{\omega_8}{\omega_1} & 0 & \omega_6 & -e^{-\imath\theta} - \frac{\omega_3}{\omega_1} \\ \omega_1 e^{\imath\phi} + \omega_4 & -\omega_6 & 0 & \omega_7 \\ -\frac{\omega_5}{\omega_1} & e^{\imath\theta} + \frac{\omega_3}{\omega_1} & -\omega_7 & 0 \end{vmatrix}.$$

Im thermodynamischen Limes berechnet sich die Freie Energie zu

$$\beta F = -\tfrac{1}{8\pi^2} \int_0^{2\pi} d\theta \int_0^{2\pi} d\phi \ln D,$$

$$D = 2a + 2b\cos\theta + 2c\cos\phi + 2d\cos(\theta - \phi) + 2e\cos(\theta + \phi),$$

$$\begin{aligned} 2a &= \omega_1^2 + \omega_2^2 + \omega_3^2 + \omega_4^2, \\ b &= \omega_1\omega_3 - \omega_2\omega_4, \\ c &= \omega_1\omega_4 - \omega_2\omega_3, \\ d &= \omega_3\omega_4 - \omega_7\omega_8, \\ e &= \omega_3\omega_4 - \omega_5\omega_6. \end{aligned} \tag{4.4}$$

Benutzt wurde

$$\begin{aligned} -\beta F &= \lim_{N\to\infty, M\to\infty} \tfrac{1}{MN} \ln Z, \\ \omega_5 = \omega_6, \qquad \omega_7 &= \omega_8 \qquad \text{(siehe (2.4))}. \end{aligned} \tag{4.5}$$

Das ist genau das Ergebnis von Fan und Wu (siehe [3, 26]; dort findet sich auch eine Untersuchung des kritischen Verhaltens).

4.2 Der inhomogene Fall: 1D-Unordnung

Nun wird der „free-fermion-case“ des 8-Vertex-Modells mit eindimensionaler Unordnung betrachtet. Die hier verwendete Methode wurde von Nieuwenhuizen und Orland [14] für das 2D-Isingmodell eingeführt. Die Unordnung ist in der y-Richtung, $\omega_i = \omega_i(m)$. Aufgrund der Translationsinvarianz in x-Richtung kann man eine eindimensionale Fouriertransformation ansetzen. Führt man nun die trivialen Integrationen aus, erhält man eine $M \times M$-Determinante, die nur auf der Diagonale und auf den Nebendiagonalen nicht verschwindet. Man kann dann versuchen, rekursive Lösungen des zu untersuchenden Problems zu finden.

Zunächst aber die Rechnung: Wir starten mit dem Ausdruck (3.5). Eine Fouriertransformation in x-Richtung ergibt:

$$\begin{aligned} \mathcal{L}(\psi^*, \psi) = \textstyle\sum_{\phi>0,m} & (\psi_4^*\psi_2(m+1) - \psi_2^*(m+1)\psi_4) + \omega_1(e^{-\imath\phi}\psi_3^*\psi_1 - e^{\imath\phi}\psi_1^*\psi_3) \\ & + \tfrac{\omega_8}{\omega_1}(\psi_1^*\psi_2 - \psi_2^*\psi_1) + \omega_7(\psi_3^*\psi_4 - \psi_4^*\psi_3) + \tfrac{\omega_5}{\omega_1}(\psi_1^*\psi_4 - \psi_4^*\psi_1) \\ & + \omega_6(\psi_2^*\psi_3 - \psi_3^*\psi_2) + \tfrac{\omega_3}{\omega_1}(\psi_4^*\psi_2 - \psi_2^*\psi_4) + \omega_4(\psi_3^*\psi_1 - \psi_1^*\psi_3). \end{aligned} \tag{4.6}$$

Die ω_i sind von m abhängig, die ψ_i von ϕ und m, sofern kein anderer Index in Klammern dahintersteht.

Beachtet man nun, daß gilt

$$\int d\bar{\psi}d\psi \exp \alpha[\bar{\psi}(\phi - \epsilon\psi) + \bar{\phi}\psi)] = \alpha\epsilon \exp\left(\frac{\alpha}{\epsilon}\bar{\phi}\phi\right),$$

so kann man die Integrationen über $\psi_4^*\psi_1$ und über $\psi_1^*\psi_4$ ausführen.
Man erhält Vorfaktoren

$$\prod_{m,\phi>0}\left(\frac{\omega_5}{\omega_1}\right)^2$$

und für die Lagrangefunktion eine quadratische Form in $\psi_3^*\psi_3$:

$$\begin{aligned}
\mathcal{L}(\psi^*,\psi) = \textstyle\sum_{\phi>0,m} \psi_3^*\psi_3 \frac{\omega_1^2\omega_7}{\omega_5}(e^{\imath\phi} - e^{-\imath\phi}) \\
+\psi_3^*[\tfrac{\omega_1}{\omega_5}(\omega_4 + \omega_1 e^{\imath\phi})\psi_2(m+1) + \tfrac{\omega_1}{\omega_5}(\omega_3 e^{\imath\phi} - \omega_2)\psi_2] \\
-[\tfrac{\omega_1}{\omega_5}(\omega_4 + \omega_1 e^{-\imath\phi})\psi_2^*(m+1) + \tfrac{\omega_1}{\omega_5}(\omega_3 e^{-\imath\phi} - \omega_2))\psi_2^* \\
-\tfrac{\omega_8}{\omega_5}(\psi_2^*\psi_2(m+1) - \psi_2^*(m+1)\psi_2).
\end{aligned} \tag{4.7}$$

Die quadratische Form kann mit Hilfe der Formel

$$\int d\psi d\bar{\psi} \exp\left(a\bar{\psi}\psi + b\bar{\psi}\eta - b\bar{\eta}\psi + c\bar{\phi}\phi\right) = a \exp\left(\frac{b^2}{a}\bar{\eta}\eta + c\bar{\phi}\phi\right)$$

ausgewertet werden. Für die Zustandssumme ergibt sich dann:

$$Z_{ffc} = \textstyle\prod_{\phi>0}\left(\prod_m \omega_5\omega_7\right) \int D\psi_2^* D\psi_2 \exp \psi_2^*(m) A_{mm'}(\phi)\psi_2(m'),$$

$$\begin{aligned}
A_{mm} = \tfrac{1}{\omega_5\omega_7}\left(\omega_1^2 + \omega_4^2 + 2\omega_1\omega_4\cos\phi\right)(m-1) \\
+\tfrac{1}{\omega_5\omega_7}\left(\omega_2^2 + \omega_3^2 - 2\omega_2\omega_3\cos\phi\right)(m),
\end{aligned} \tag{4.8}$$

$$A_{m,m+1} = A_{m+1,m}^* = \tfrac{1}{\omega_5\omega_7}\left[\omega_1\omega_3 - \omega_2\omega_4 + e^{-\imath\phi}(\omega_7\omega_8 - \omega_1\omega_2) - e^{\imath\phi}(\omega_7\omega_8 - \omega_3\omega_4)\right](m).$$

Das ist eine $M \times M$ Determinante. Es gilt folgende Rekursionsformel für die Unterdeterminanten Δ_m:

$$\begin{aligned}
\Delta_{-1} = 0, \quad \Delta_0 = 1, \\
\Delta_{m+1} = A_{m+1,m+1}\Delta_m - A_{m,m+1}A_{m+1,m}^*\Delta_{m-1}.
\end{aligned} \tag{4.9}$$

Ein bemerkenswerter Spezialfall im „free-fermion-case“ ist das sog. modifizierte KDP-Modell (Kalium-Dihydrogen-Phosphat), siehe [3, 5, 6]. Der kritische Exponent der spezifischen Wärme ist hier $\frac{1}{2}$, abweichend von dem üblichen Onsager-Verhalten mit logarithmischer Divergenz.
Man erhält es, indem man zwei Freiheitsgrade „einfriert“: Setze

$$\omega_1\omega_2 = \omega_7\omega_8 = 0, \qquad \omega_3\omega_4 = \omega_5\omega_6,$$

und wähle hierzu etwa $\omega_1 = \omega_8 = 0$. Es ergibt sich:

$$Z_{KDP} = \prod_{\phi>0} \left(\prod_m \omega_5\omega_7\right) \int D\psi_2^* D\psi_2 \exp \psi_2^*(m) A_{mm'}(\phi)\psi_2(m'), \tag{4.10}$$

$$\begin{aligned} A_{m,m} &= \tfrac{\omega_4^2}{\omega_5\omega_7}(m-1) + \tfrac{1}{\omega_5\omega_7}\left(\omega_2^2 + \omega_3^2 - 2\omega_2\omega_3\cos\phi\right)(m), \\ A_{m,m+1} &= A_{m+1,m}^* = \tfrac{\omega_4}{\omega_5\omega_7}\left(-\omega_2 + \omega_3 e^{\imath\phi}\right)(m). \end{aligned} \tag{4.11}$$

Die Determinantenrekursionsformel lautet im KDP-Fall:

$$\begin{aligned} \omega_m := \tfrac{\omega_4^2}{\omega_5\omega_7}(m), \quad \alpha_m := \tfrac{1}{\omega_5\omega_7}\left(\omega_2^2 + \omega_3^2 - 2\omega_2\omega_3\cos\phi\right)(m), \\ \Delta_{m+1} = (\omega_m + \alpha_{m+1})\Delta_m - \omega_m\alpha_m\Delta_{m-1}. \end{aligned} \tag{4.12}$$

Kapitel 5

Der Isingfall

In diesem Kapitel wird das kritische Verhalten das Modells von Fan und Wu untersucht, wobei die Boltzmannfaktoren unabhängige Zufallsvariable sind. Wir betrachten den Fall sog. „layered quenched disorder“.
Die hier verwendete Methode wurde von Nieuwenhuizen und Orland [14] für das zweidimensionale Isingmodell eingeführt.
Der Grundgedanke ist, eine Integralgleichung aufzustellen, die die Größe $\Omega(\phi) = \lim_{m\to\infty} \ln \frac{\Delta_{m+1}}{\Delta_m}(\phi)$ enthält. Diese Integralgleichung wird dann in eine äquivalente lineare Differentialgleichung 1. Ordnung umgewandelt.
Dies ist nur für sehr spezielle Kopplungen möglich, im allgemeinen exponentielle Verteilungen.
Nach einer Variablentransformation erhält man dann durch Potenzreihenansatz $\Omega(\phi)$ als Kettenbruch.

5.1 Integralgleichung für die Freie Energie

Im thermodynamischen Limes gilt für die Freie Energie:

$$\begin{aligned} -\beta F &= \lim_{\substack{M\to\infty \\ N\to\infty}} \frac{1}{MN} \ln Z \\ &= \frac{1}{2} \lim_{M\to\infty} \frac{1}{M} \sum_m \ln \omega_5\omega_7 + \lim_{\substack{N\to\infty \\ M\to\infty}} \frac{1}{MN} \sum_{\phi>0} \Delta_M(\phi) \\ &=: \frac{1}{2} < \ln \omega_5\omega_7 > + \lim_{N\to\infty} \frac{1}{N} \sum_{\phi>0} \Omega(\phi) \end{aligned} \tag{5.1}$$

mit

$$\begin{aligned} \Omega(\phi) &= \lim_{M\to\infty} \frac{1}{M} \ln \Delta_M \\ &= \lim_{M\to\infty} \frac{1}{M} \sum_{m=1}^{M} \ln \frac{\Delta_m(\phi)}{\Delta_{m-1}(\phi)}. \end{aligned} \tag{5.2}$$

Wegen $\Delta_m(\phi) = \Delta_m(-\phi)$ gilt $\Omega(\phi) = \Omega(-\phi)$ und

$$\lim_{N\to\infty} \frac{1}{N} \sum_{\phi>0} \Omega(\phi) = \frac{1}{2\pi} \int_0^{\pi} d\phi \Omega(\phi) = \frac{1}{4\pi} \int_0^{2\pi} d\phi \Omega(\phi).$$

Maßgeblich für das thermodynamische Verhalten ist also die Größe $\frac{\Delta_{m+1}}{\Delta_m}$ im Limes $m \to \infty$.

Um die „free-fermion"-Bedingung für alle Temperaturen zu erfüllen, setzen wir

$$\omega_1\omega_2 = \omega_5\omega_6, \qquad \omega_3\omega_4 = \omega_7\omega_8. \tag{5.3}$$

Man hat also sechs unabhängige Variablen, wir wählen

$$\omega_1, \omega_2, \omega_3, \omega_4, \omega_5, \omega_7. \tag{5.4}$$

Zunächst wird eine Hilfsgröße S_m eingeführt:

$$S_m = \frac{\Delta_{m+1}}{\Delta_m} - \frac{1}{\omega_5\omega_7}\left(\omega_2^2 + \omega_3^2 - 2\omega_2\omega_3\cos(\phi)\right)(m+1). \tag{5.5}$$

Die Rekursionformel für S_m enthält dann nur Zufallsvariablen vom Gitterplatz m oder links davon. Es ergibt sich nach längerer Rechnung:

$$S_m = \frac{\frac{\omega_1\omega_4}{\omega_5\omega_7}\left(\frac{\omega_1}{\omega_4} + \frac{\omega_4}{\omega_1} + 2\cos\phi\right)(m)S_{m-1} + \frac{\omega_1\omega_2\omega_3\omega_4}{\omega_5^2\omega_7^2}(m)4\sin^2\phi}{\frac{\omega_2\omega_3}{\omega_5\omega_7}\left(\frac{\omega_2}{\omega_3} + \frac{\omega_3}{\omega_2} - 2\cos\phi\right)(m) + S_{m-1}}. \tag{5.6}$$

Die Rekursionsformel für S_m hat die Form einer Möbiustransformation:

$$S_m = \frac{A_m S_{m-1} + B_m}{S_{m-1} + C_m}. \tag{5.7}$$

Beachte, daß gilt: $S_m + C_{m+1} = \frac{\Delta_{m+1}}{\Delta_m}$.

Im homogenen Fall läßt sich $\Omega(\phi)$ direkt angeben:

$$\begin{gathered}\Omega(\phi) = \ln Y_\infty, \\ Y_\infty = \lim_{m\to\infty} Y_m, \qquad Y_m = \tfrac{\Delta_m}{\Delta_{m-1}}, \qquad Y_0 = \infty.\end{gathered} \tag{5.8}$$

Mit Hilfe der Rekursionsformel für S_m folgt nämlich:

$$\begin{gathered}Y_m = \rho_m - \tfrac{\sigma_m}{Y_{m-1}}, \\ \rho_m = (A+C)_m, \qquad \sigma_m = (AC-B)_m,\end{gathered} \tag{5.9}$$

$$\begin{gathered}\cosh\ln\tfrac{Y_\infty}{\sqrt{AC-B}} = \tfrac{1}{2}\tfrac{A+C}{\sqrt{AC-B}}, \\ \sinh\ln\tfrac{S_\infty}{\sqrt{B}} = \tfrac{1}{2}\tfrac{A-C}{\sqrt{B}}, \\ Y_\infty = S_\infty + C.\end{gathered}$$

Andererseits kann man Y_M direkt als Kettenbruch angeben:

$$Y_m = \rho_m - \frac{\sigma_m}{\rho_{m-1}-}\frac{\sigma_{m-1}}{\rho_{m-2}-}\cdots\frac{\sigma_2}{\rho_1}. \tag{5.10}$$

Es wird sich zeigen, daß der singuläre Beitrag zur Freien Energie im inhomogenen Fall ebenfalls als Kettenbruch geschrieben werden kann.

Nun kommen wir zum inhomogenen Fall:

Seien J_i die auftretenden Zufallsvariablen und $\rho(J_i)$ deren Verteilungen. Die Abhängigkeit von den J_i erscheint dann in den Parametern $A(J_i), B(J_i), C(J_i)$.
Man definiert nun

$$D_m(u) :=< \ln(S_m - u) >_m, \tag{5.11}$$

wobei $<>_m$ Mittelung über die auftretenden Zufallsvariablen bedeutet.
Die Rekursionsformel für S_m führt zu einer Rekursionsformel für D_m:

$$D_m(u) = \int \prod \rho_i(J_i) dJ_i D_{m-1}\left(-\frac{B_m - C_m u}{A_m - u}\right) - D_{m-1}(-C_m) - \ln(A_m - u). \tag{5.12}$$

Im Grenzfall $m \to \infty$ ergibt sich folgende Integralgleichung für $D(u) := \lim_{m\to\infty} D_m(u)$:

$$D(u) = \int \prod \rho_i(J_i) dJ_i D\left(-\frac{B - Cu}{A - u}\right) - D(-C) + \ln(A - u). \tag{5.13}$$

Die die Freie Energie bestimmende Größe $\Omega(\phi)$ ergibt sich dann als

$$\Omega(\phi) = \lim_{m\to\infty} < \ln \frac{\Delta_{m+1}}{\Delta_m}(\phi) >_m = \int \prod \rho_i(J_i) dJ_i D(-C(J_i)), \tag{5.14}$$

und mit den Bezeichnungen

$$\Psi(u) = A - u, \qquad \Phi(u) = -\frac{B - Cu}{A - u} \tag{5.15}$$

folgt

$$D(u) = -\Omega + \int \prod \rho_i(J_i) dJ_i \left(D \circ \Phi(u) + \ln \Psi(u)\right). \tag{5.16}$$

Um diese Integralgleichung in eine Differentialgleichung umwandeln zu können, muß man die Verteilungen geeignet spezialisieren. Die Idee ist, (5.16) partiell zu integrieren, die Ableitung nach x in eine Ableitung nach u umzuwandeln, diese vor das Integral zu ziehen und dann die ursprüngliche Gleichung einzusetzen, so daß das Integral verschwindet.

Man beschränkt sich auf eine einzige Zufallsvariable x und setzt an:

$$\rho(x) = \begin{cases} 0 & : \quad x < 0 \\ qe^{-x} + p\delta(x) & : \quad x \geq 0, \quad p + q = 1 \end{cases}. \tag{5.17}$$

p ist die Wahrscheinlichkeit, mit der der homogene Fall angenommen wird, q ist die Wahrscheinlichkeit für den inhomogenen Fall.
Außerdem fordert man:

$$\begin{aligned} \frac{\partial \ln \Psi}{\partial x} &= 4K\left(u\frac{\partial \ln \Psi}{\partial u} - 1\right), \\ \frac{\partial \Phi}{\partial x} &= 4Ku\frac{\partial \Phi}{\partial u}. \end{aligned} \tag{5.18}$$

Man stellt durch Nachrechnen fest, daß dies nur für

$$C = \text{const.}, \qquad \frac{A'}{A} = \frac{B'}{B} = -4K \tag{5.19}$$

erfüllt ist.
Für $D(u)$ folgt

$$D(u) = q\int_0^\infty dx e^{-x}[D\circ\Phi(u,x) + \ln\Psi(u,x)] + pD\circ\Phi(u,0) + p\ln\Psi(u,0) - \Omega. \tag{5.20}$$

Partielle Integration ergibt:

$$\begin{aligned} D(u) &= q\int_0^\infty dx e^{-x}\left[D'\circ\Phi\frac{\partial\Phi}{\partial x} + \frac{\partial\ln\Psi}{\partial x}\right] + D\circ\Phi + \ln\Psi - \Omega \\ &= q\int_0^\infty dx e^{-x} 4Ku\left[D'\circ\Phi\frac{\partial\Phi}{\partial u} + \frac{\partial\ln\Psi}{\partial u}\right] + D\circ\Phi + \ln\Psi - \Omega - 4Kq. \end{aligned} \tag{5.21}$$

Setzt man nun die ursprüngliche Integralgleichung ein, erhält man

$$D(u) = 4Ku\partial_u[D(u) - pD\circ\Phi(u) - p\ln\Psi(u)] + D\circ\Phi(u) + \ln\Psi(u) - \Omega - 4qK. \tag{5.22}$$

Dies ist eine lineare, inhomogene DGL erster Ordnung, welche allerdings außer der Variablen u noch die aus der Möbiustransformation stammende Funktion $\Phi(u)$ enthält.

5.2 Exakte Lösung des Modells

Eine zweite Möbiustransformation $u = s(y)$ wird diese Gleichung auf eine Standardform bringen, die nur die Variablen y und ky mit geeignetem reellen k enthält.
Damit die im folgenden auftretenden Formeln übersichtlich bleiben, ist es zweckmäßig, einen Notationswechsel vorzunehmen.
Gegeben ist eine Transformation

$$\Phi(u) = \frac{au+1}{cu+d}, \qquad \Psi(u) = -\frac{d}{c} - u. \tag{5.23}$$

Gesucht wird eine Transformation

$$s(y) = \frac{\alpha y + 1}{\gamma y + \delta}, \tag{5.24}$$

so daß gilt:

$$\Phi\circ s(y) = s\left(ye^{-2\mu}\right). \tag{5.25}$$

Man verifiziert durch Einsetzen, daß es für δ und für den Quotienten $\frac{\gamma}{\alpha}$ zwei Lösungen gibt:

$$\begin{aligned} \delta^2 + \delta(a-d) - c = 0, \\ \left(\frac{\gamma}{\alpha}\right)^2 + \frac{\gamma}{\alpha}(a-d) - c = 0. \end{aligned} \tag{5.26}$$

Bezeichne mit $\delta_\pm$ die Lösungen mit der positiven und mit der negativen Wurzel.
Damit δ reell ist, muß $ad > c > 0$ gelten. Im Fall $(a+d) < 0$ gibt es ein reelles μ mit

$$e^{\mp 2\mu} = \frac{a+\delta_+}{a+\delta_-}, \tag{5.27}$$

wir wählen das Minuszeichen. Dann ist μ positiv. Es folgt

$$\cosh\mu = \frac{1}{2}\frac{|a+d|}{\sqrt{ad-c}}. \tag{5.28}$$

e^μ ist bis auf einen von ϕ unabhängigen Vorfaktor der Fixpunkt der homogenen Rekursionsformel für $\frac{\Delta_{m+1}}{\Delta_m}$, es gilt nämlich mit den Ersetzungen

$$B = \frac{1}{c}, \qquad C = -\frac{a}{c}, \qquad A = -\frac{d}{c}: \tag{5.29}$$

$$\frac{Y_\infty}{\sqrt{AC - B}} = e^\mu, \text{ (siehe (5.10))}. \tag{5.30}$$

$\delta_\pm$ läßt sich dann durch e^μ ausdrücken, und zwar ist

$$\begin{aligned} \delta_\pm &= \operatorname{sg}(a+d)\sqrt{ad-c}e^{\mp\mu} - a \\ &= \frac{\operatorname{sg}(a+d)c}{e^{\mp\mu}\sqrt{ad-c} - \operatorname{sg}(a+d)d} \\ &= \frac{\operatorname{sg}(a+d)c}{\operatorname{sg}(a+d)a - e^{\pm\mu}\sqrt{ad-c}}. \end{aligned} \tag{5.31}$$

Um technischen Komplikationen aus dem Weg zu gehen (siehe (5.49)), wählen wir $\delta := \delta_-$; durch die Transformation ist lediglich der Quotient $\frac{\gamma}{\alpha} = \delta_+$ festgelegt.
Man parametrisiert nun $\gamma = e^{-\nu}\delta, \quad \nu$ zunächst beliebig.
Dann ergibt sich für $s(y)$:

$$s(y) = \frac{\frac{ye^{-\nu}}{\delta_+} + \frac{1}{\delta_-}}{ye^{-\nu} + 1}. \tag{5.32}$$

Für $\Psi \circ s(y)$ folgt:

$$\Psi \circ s(y) = -\frac{e^\mu\sqrt{ad-c}}{\operatorname{sg}(a+d)c}\frac{1 + ye^{-\nu}e^{-2\mu}}{1 + ye^{-\nu}}. \tag{5.33}$$

Setzt man also $r(y) = \ln(1 + ye^{-\nu})$, so ist

$$\ln \Psi \circ s(y) + r(y) - r\left(ye^{-\mu}\right) = \text{konstant}, \tag{5.34}$$

und

$$G(y) := D \circ s(y) + r(y) \tag{5.35}$$

erfüllt die Differentialgleichung

$$\begin{aligned} &\left[1 - 4K\frac{s}{s'}(y)\partial_y\right]\left[G(y) - G\left(ye^{-2\mu}\right)\right] \\ = \; &-4Kq\left(\frac{sr'}{s'}(y) + 1\right) + \left[\ln \Psi \circ s(y) + r(y) - r\left(ye^{-2\mu}\right)\right] + qG\left(ye^{-2\mu}\right) - \Omega. \end{aligned} \tag{5.36}$$

Bei der Herleitung wurde nur (5.34) benutzt.
Außerdem gilt:

$$\frac{s}{s'}(y) = \frac{\left(y + e^\nu\frac{\delta_+}{\delta_-}\right)(y + e^\nu)}{e^\nu\left(1 - \frac{\delta_+}{\delta_-}\right)}. \tag{5.37}$$

Nun nimmt man an: $\delta_+ > 0, \delta_- < 0$ und definiert ν:

$$e^{\nu}\frac{\delta_+}{\delta_-} = -e^{-\nu}. \tag{5.38}$$

Damit ergibt sich

$$\sinh\nu = \frac{1}{2}\frac{a-d}{\sqrt{c}}. \tag{5.39}$$

e^{ν} ist bis auf einen einfachen Vorfaktor Fixpunkt der homogenen Rekursionsformel für S_m, denn es gilt (5.29)

$$\frac{S_\infty}{\sqrt{B}} = e^{\nu} \quad \text{(siehe (5.10))}. \tag{5.40}$$

Die Differentialgleichung für G hat dann die singulären Punkte $e^{-\nu}$ und $-e^{\nu}$.

Zusammenfassend läßt sich also sagen:

$$D_m(u) :=< \ln(S_m - u) >_m \qquad (S_m > 0) \tag{5.41}$$

erfülle für $m \to \infty$ die Differentialgleichung

$$D(u) = 4Ku\partial_u[D(u) - pD\circ\Phi(u) - p\ln\Psi(u)] + D\circ\Phi(u) + \ln\Psi(u) - \Omega - 4qK \tag{5.42}$$

mit

$$\Phi(u) = \frac{au+1}{cu+d}, \qquad \Psi(u) = -\frac{d}{c} - u. \tag{5.43}$$

Im Fall

$$\begin{aligned} &ad > c > 0, \\ &(a+d) < 0 \end{aligned} \tag{5.44}$$

erfüllt

$$\begin{aligned} G_m(y) &:= D_m\circ s(y) + r(y) \\ &= < \ln\left[S_m(1+ye^{-\nu}) - \left(\frac{1}{\delta_-} + \frac{1}{\delta_+}ye^{-\nu}\right)\right] > \end{aligned} \tag{5.45}$$

im Grenzfall $m \to \infty$ die inhomogene lineare Differentialgleichung 1.Ordnung

$$[1 + \eta(e^{\nu}+y)(e^{-\nu}-y)\partial_y][G(y) - pG(ye^{-2\mu})] = qG(ye^{-2\mu}) - q\eta(y+e^{\nu}) - \Omega_r. \tag{5.46}$$

Dabei sind

$$\begin{gathered} \Omega_r = \Omega + \mu + \ln\tfrac{\sqrt{ad-c}}{c}, \\ \cosh\mu = \tfrac{1}{2}\tfrac{|a+d|}{\sqrt{ad-c}}, \qquad \sinh\nu = \tfrac{1}{2}\tfrac{a-d}{\sqrt{c}}, \\ \eta = \tfrac{4K}{2\cosh\nu}, \qquad \delta_\pm = \mathrm{sg}(a+d)\sqrt{ad-c}e^{\mp\mu} - a, \\ s(y) = \tfrac{\frac{1}{\delta_+}ye^{-\nu}+\frac{1}{\delta_-}}{ye^{-\nu}+1}, \qquad r(y) = \ln(1+ye^{-\nu}). \end{gathered} \tag{5.47}$$

Am singulären Punkt $y = -e^{\nu}$ ist $G(y)$ bekannt, weil die Abhängigkeit von S_m dort verschwindet, siehe (5.45):

$$G(-e^{\nu}) = \ln\left(\frac{1}{\delta_+} - \frac{1}{\delta_-}\right). \tag{5.48}$$

An der Stelle $y = 0$ ist $G(y)$ regulär:

$$G_m(0) =< \ln\left(S_m - \frac{1}{\delta_-}\right) >_m . \tag{5.49}$$

Im ungestörten Fall ($K = q = 0$) löst $G(y) = 0$ die Differentialgleichung, und für $q \neq 0$ macht man den Ansatz

$$G(y) = G(0) - \sum_{k=1}^{\infty} \frac{qC_k}{k(1 - pe^{-2k\mu})} y^k. \tag{5.50}$$

Man erhält dann eine spezielle Lösung, die Ω_r festlegt. Für C_k ergibt sich die Rekursionsformel

$$C_{k-1} - C_{k+1} = \rho_k C_k, \qquad k = 1, 2, 3, \ldots, \qquad C_0 = 1, \tag{5.51}$$
$$\rho_k = -2\sinh\nu + \frac{1}{\eta k}\frac{1 - e^{-2k\mu}}{1 - pe^{-2k\mu}}.$$

Die Terme in y^0 geben für Ω_r einen einfachen Ausdruck:

$$\Omega_r = q\eta(C_1 - e^{\nu}). \tag{5.52}$$

Die naive Lösung für C_1 in Form eines Kettenbruchs

$$C_1 = \frac{1}{\frac{C_0}{C_1}} = \frac{1}{\rho_1 +}\frac{1}{\rho_2 +}\frac{1}{\rho_3 +}\cdots \tag{5.53}$$

konvergiert gewiß dann, wenn ν und η unterschiedliches Vorzeichen haben (siehe z. B. [15] , p.62, chapter 15 : Konvergenzumgebungen).
Der Fall mit gleichem Vorzeichen bereitet Probleme, weil dann ρ_k für bestimmte Werte von ν verschwindet; in diesem Fall muß man eine andere Methode anwenden, um C_1 zu bestimmen (z.B. numerisch oder singuläre Störungsentwicklung [14, 13]).

Diese Formeln werden nun auf das Modell von Fan und Wu spezialisiert.
Setze

$$z_1 = \frac{\omega_1}{\omega_4}, \qquad z_2^2 = \frac{\omega_1\omega_4}{\omega_5\omega_7}, \qquad z_3^2 = \frac{\omega_2\omega_3}{\omega_5\omega_7}, \qquad z_4 = \frac{\omega_2}{\omega_3}. \tag{5.54}$$

Dann ist

$$\begin{aligned} S_m &= \frac{z_2^2(z_1 + \frac{1}{z_1} + 2\cos\phi)S_{n-1} + z_2^2 z_3^2 4\sin^2\phi}{z_3^2(z_4 + \frac{1}{z_4} - 2\cos\phi) + S_{n-1}}, \\ \Phi(u) &= \frac{uz_3^2(z_4 + \frac{1}{z_4} - 2\cos\phi) - 4z_2^2 z_3^2\sin^2\phi}{z_2^2(z_1 + \frac{1}{z_1} + 2\cos\phi) - u}, \\ \Psi(u) &= z_2^2(z_1 + \frac{1}{z_1} + 2\cos\phi) - u. \end{aligned} \tag{5.55}$$

Im folgenden seien lediglich ω_1 und ω_4 vom Gitterplatz abhängig; ebenso ω_6 und ω_8, um die "free-fermion"-Bedingung zu erfüllen:

$$\omega_i(m) = \omega_i e^{-2Kx_m}. \tag{5.56}$$

Dann ist

$$z_2^2(m) = z_2^2 e^{-4Kx_m}. \tag{5.57}$$

Es gelten die Voraussetzungen $ad > c > 0, (a+d) < 0$. Die Standardparametrisierung ergibt:

$$\begin{aligned}
\sinh\nu &= \frac{1}{4\sin\phi}\left(\frac{z_2}{z_3}\left(z_1+\frac{1}{z_1}\right) - \frac{z_3}{z_2}\left(z_4+\frac{1}{z_4}\right) + 2\cos\phi\left(\frac{z_2}{z_3}+\frac{z_3}{z_2}\right)\right), \\
\cosh\mu &= \frac{1}{2}\frac{\frac{z_2}{z_3}\left(z_1+\frac{1}{z_1}\right) + \frac{z_3}{z_2}\left(z_4+\frac{1}{z_4}\right) + 2\cos\phi\left(\frac{z_2}{z_3}-\frac{z_3}{z_2}\right)}{\sqrt{\left(z_1+\frac{1}{z_1}\right)\left(z_4+\frac{1}{z_4}\right) - 2\cos\phi\left(\left(z_1+\frac{1}{z_1}\right)-\left(z_4+\frac{1}{z_4}\right)\right) - 4}}.
\end{aligned} \tag{5.58}$$

Für die Freie Energie folgt nach (5.2)

$$-\beta F = -\beta F_0 - \beta F_r, \tag{5.59}$$

$$-\beta F_0 = \frac{1}{2}\ln\omega_5\omega_7 - \frac{1}{2}z_2 z_3\left(\sqrt{z_1}-\frac{1}{\sqrt{z_1}}\right)\left(\sqrt{z_4}+\frac{1}{\sqrt{z_4}}\right) - \int_0^\pi \frac{d\phi}{2\pi}\mu(\phi), \tag{5.60}$$

$$-\beta F_r = q\int_0^\pi \frac{d\phi}{2\pi}\eta(\phi)(C_1(\phi) - e^{\nu(\phi)}). \tag{5.61}$$

Der singuläre Teil der Freien Energie ist in F_r, speziell im Koeffizienten $C_1(\phi)$ enthalten, F_0 ist der Ausdruck im homogenen Fall.

5.3 Kritisches Verhalten des Modells von Fan und Wu

Es wird sich zeigen, daß die Freie Energie im ferromagnetischen Fall eine wesentliche Singularität derselben Form wie im 2D-Isingmodell besitzt. Wie beim 2D-Isingmodell wird also das kritische Verhalten gegenüber dem geordneten System abgeschwächt.
Es wird der Fall ferromagnetischer Unordnung betrachtet: $K > 0$, also $\eta > 0$.
Das singuläre Verhalten wird bestimmt durch Werte von ϕ nahe bei 0 oder nahe bei π, siehe [3].
Im Fall $\omega_2 = \max(\omega_1, \omega_2, \omega_3, \omega_4)$ ist nur $\phi = 0$ relevant.
Jedenfalls divergiert $\nu(\phi)$ für $\phi \to 0$, und es zeigt sich, daß in der Nähe des kritischen Punktes $\nu \to +\infty$ geht, also der Fall gleicher Vorzeichen vorliegt. Um diesen Fall zu behandeln, macht man eine singuläre Störungsentwicklung [14].
Die kritische Temperatur wird hier in Formel (5.68) definiert durch eine Selbstkonsistenzforderung; man erhält jedenfalls dasselbe Ergebnis, wenn man den Transfermatrizenformalismus von McCoy und Wu [17, 26] anwendet.

Man setzt in der Potenzreihe

$$C_k = e^{k\nu}a_k \tag{5.62}$$

und vernachlässigt in der Rekursionsformel alle Terme, die mindestens um den Faktor $e^{-2\nu} \sim \phi^2$ kleiner sind als die führenden Terme. Dies führt auf eine neue Rekursionsformel für a_k:

$$\begin{aligned}
a_{k+1} &= \Sigma_k a_k + e^{-2\nu}a_{k-1}, \\
\Sigma_k &= 1 - \frac{1-e^{-2k\mu}}{4Kk(1-pe^{-ek\mu})}.
\end{aligned} \tag{5.63}$$

Beachte, daß Σ_k unabhängig von ν ist!
Wir betrachten nun a und Σ als Funktionen eines komplexen Parameters:

$$a(k) := a_k, \qquad \Sigma(k) := \Sigma_k. \tag{5.64}$$

Die Lösung der Rekursionsgleichung für $e^{-2\nu} = 0$ läßt sich schreiben als

$$a_0(s) = C \prod_{n \geq 0} \frac{\Sigma(n)}{\Sigma(s+n)}. \tag{5.65}$$

Die Faktoren $\Sigma(n)$ sind eingefügt, um die Konvergenz der Reihe zu garantieren.

Wir kommen nun zur Lokalisierung der kritischen Temperatur: Terme mit $e^{-2\nu}$ sind in der Rekursionsformel dann relevant, wenn an einer Stelle $s = s_0$ die Funktion $\Sigma(s)$ eine Nullstelle hat.
In unserem Fall passiert dies bei der Festlegung der Normierungsbedingung $C_0 = a_0 = 1$ für $\theta = 0$ bei

$$\Sigma(0) = 1 - \frac{\mu}{2qK} = 0. \tag{5.66}$$

Bei $\theta = 0$ gilt im betrachteten Fall

$$\mu(\theta = 0) = \left| \ln \frac{\omega_2 - \omega_3}{\omega_1 + \omega_4} \right| = \left| \ln \frac{\left|\sqrt{z_4} - \frac{1}{\sqrt{z_4}}\right|}{\sqrt{z_1} + \frac{1}{\sqrt{z_1}}} \frac{z_3}{z_2} \right|. \tag{5.67}$$

Im homogenen Fall ist der kritische Punkt durch $\mu = 0$ gegeben.
Im inhomogenen Fall geht $\nu \to +\infty$ für

$$(\omega_1 + \omega_4) e^{-2qK} = \omega_2 - \omega_3. \tag{5.68}$$

Der zusätzliche Exponentialfaktor ist die mittlere Kopplungsstärke der mit Zufallsvariablen modellierten Kopplungen $\omega_1(x)$ und $\omega_4(x)$.
Man führt eine Hilfsgröße $b(s)$ ein:

$$b(s) = a(s) C^{-1} e^{2\nu s} \prod_{n \geq 1} \frac{\Sigma(n)}{\Sigma(n+s)} \tag{5.69}$$

und geht mit $b(s)$ in die rechte Seite, mit $a_0(s)$ in die linke Seite der Rekursionsformel (5.63). Die linke Seite ist nicht singulär an der betrachteten Stelle.
$b(s)$ erfüllt dann folgende Differenzengleichung:

$$b(s) + b(s-1) = L(s) \tag{5.70}$$

mit

$$L(s) = e^{2\nu s} \frac{\Sigma(0)}{\Sigma(s)} \prod_{n \geq 1} \frac{\Sigma(n)^2}{\Sigma(n+s)^2}.$$

Die Lösung dieser Gleichung kann man als komplexes Wegintegral schreiben:

$$b(s) = \int_{0 < Re\, t < 1} \frac{dt}{2\pi} \frac{\pi}{\sin \pi t} L(s+t). \tag{5.71}$$

Man integriert über alle Pole von L und alle Pole von $\frac{1}{\sin(\pi t)}$, die auf der negativen reellen Halbachse liegen. Dies ist möglich, weil $L(s)$ für große s verschwindet.
Für $a(s)$ folgt aus Gleichung (5.69)

$$a(s) = C \int_{0<Re\, t<1} \frac{dt}{2\pi\imath} \frac{\pi}{\sin \pi t} e^{2\nu t} \frac{\Sigma(0)}{\Sigma(s+t)} \prod_{n\geq 1} \frac{\Sigma(n)\Sigma(s+n)}{\Sigma(s+t+n)^2}. \tag{5.72}$$

Diese Formel muß ausgewertet werden für $s = 0$ (Normierung) und für $s = 1$. Zu untersuchen sind die Nullstellen und die Pole der Funktion $\Sigma(s)$.
Pole tauchen nur auf für $Re s < 0$ und tragen deshalb zum kritischen Verhalten nicht bei.
Um die Nullstellen von $\Sigma(s)$ zu untersuchen, schreibt man

$$\begin{aligned} \Sigma(k) &= \frac{4Kk - 1}{4Kk(1 - pe^{-2k\mu})}(1 - f(k)), \\ f(k) &= e^{-2k\mu} \frac{1 - p4Kk}{1 - 4Kk}. \end{aligned} \tag{5.73}$$

Nullstellen von Σ sind (bis auf $s = 0$) Punkte mit

$$f(s) = 1 \quad \text{oder} \quad e^{2\mu s} = \frac{1 - p4Ks}{1 - 4Ks}. \tag{5.74}$$

Im folgenden wird kurz die Lage dieser Stellen in der komplexen Ebene diskutiert.

Für $p = 1$ ergibt sich auf der imaginären Achse ein String $s_j = \frac{2\pi\imath}{2\mu} j \quad j = \pm 1, \pm 2, \cdots$.
Für $p \neq 1 \quad (\mu, K > 0)$ rückt dieser String in die linke Halbebene, und für $2\mu > 4K$ gibt es noch eine zusätzliche positive, reelle Nullstelle s_0.
Also ist allein diese für das kritische Verhalten relevant.

Zum Beweis der oben gemachten Aussagen betrachte o.B.d.A. die Gleichung

$$e^{-\mu s} \frac{1 - ps}{1 - s} = 1. \tag{5.75}$$

Elementare Kurvendiskussion ergibt reelle Nullstellen:

$$s_{0,1} = 0, \qquad s_{0,2} > 0 \text{ für } \mu > q, \qquad s_{0,2} < 0 \text{ für } \mu < q. \tag{5.76}$$

Sei im folgenden $\mu > q$.
Für die komplexen Lösungen gilt:
Der Realteil komplexer Lösungen ist entweder negativ im Intervall $\left(\frac{\ln p}{\mu}, 0\right)$ oder größer als $s_{0,2}$.
Dies kann man zeigen, indem man

$$\left|e^{-\mu s}\right|^2 |1 - ps|^2 = |1 - s|^2 \tag{5.77}$$

auswertet. Mit $s = \alpha + \imath\beta$ ist

$$\beta^2 = \frac{e^{-2\mu\alpha}(1 - p\alpha)^2 - (1 - \alpha)^2}{1 - e^{-2\mu\alpha}p^2} > 0. \tag{5.78}$$

Das Wandern der Stellen $s_{0,j}$ in die linke Halbebene kann man nachweisen, indem man in (5.73) α und β als implizite Funktionen von p betrachtet:
Mit $\alpha_j = 0, \beta_j = \frac{2\pi j}{\mu}$ für $p = 1$ folgt

$$\alpha_j'(p = 1) = \frac{1}{\mu} \frac{\left(\frac{2\pi j}{\mu}\right)^2}{\left(\frac{2\pi j}{\mu}\right)^2 + 1}. \tag{5.79}$$

Da die Abhängigkeit von p stetig ist, bleibt für $\mu > q$ tatsächlich jede Wurzel s_j mit $j \neq 0$ in der linken Halbebene.

Wir haben also für große ν

$$\begin{aligned} a(0) &= C\left(1 + \frac{\pi}{\sin \pi s_0} e^{2\nu s_0} \frac{\Sigma(0)}{\Sigma'(s_0)} \prod_{n\geq 1} \frac{\Sigma(n)^2}{\Sigma(n+s_0)^2}\right), \\ a(1) &= C\Sigma(0). \end{aligned} \tag{5.80}$$

Damit ergibt sich:

$$-\beta F_r = -qK + 2qK \int_0^\pi \frac{d\theta}{\pi} \frac{\Sigma(0)}{1 + \frac{\pi}{\sin \pi s_0} \frac{e^{2\nu s_0}\Sigma(0)}{\Sigma'(0)} \prod_{n\geq 1} \frac{\Sigma(n)^2}{\Sigma(n+s_0)^2}}. \tag{5.81}$$

Um das führende kritische Verhalten näher zu untersuchen, definiert man sich eine Variable τ, die die Abweichung von der kritischen Temperatur beschreibt:

$$\mu(\theta = 0) = 2qK(1 - \tau). \tag{5.82}$$

Eine Taylorentwicklung um $T = T_c$ führt in erster Ordung auf:

$$\tau = (T - T_c) \frac{1}{2qKk_B T_c^2} \left(\frac{e_1\omega_1 + e_4\omega_4}{\omega_1 + \omega_4} - \frac{e_2\omega_2 - e_3\omega_3}{\omega_2 - \omega_3}\right)_{T=T_c}. \tag{5.83}$$

Nun wird die Lage der reellen Nullstelle s_0 nahe der kritischen Temperatur bestimmt.
Dazu setzt man in (5.73) $\mu(\theta = 0)$ ein und faßt s_0 als implizit definierte Funktion von τ auf. Man findet nach längerer Rechnung

$$s_0 = \frac{-\tau}{4K(1+p)} \left[1 + \frac{4\tau(q^2 + 3p)}{3(2p+q)^2} + O(\tau^2)\right]. \tag{5.84}$$

Die Terme im Integral werden nun in Potenzen von s_0 entwickelt. Wir finden in erster Ordnung in s_0:

$$\begin{aligned} \frac{\pi}{\sin \pi s_0} \frac{\Sigma(0)}{\Sigma'(s_0)} &= \frac{\Sigma(s_0 - s_0)}{s_0 \Sigma'(s_0)} = -1 + \frac{1}{2} s_0 \frac{\Sigma''(s_0)}{\Sigma'(s_0)} \\ &= -1 + \frac{1}{2} s_0 \frac{\Sigma''(0)}{\Sigma'(0)} = -(1 + 2\alpha_1 s_0), \end{aligned} \tag{5.85}$$

$$\alpha_1 = K \frac{\frac{2}{3}q^2 + 4p}{q + 2p}.$$

Das unendliche Produkt ergibt

$$\prod_{n\geq 1} \frac{\Sigma(n)^2}{\Sigma(n+s_0)^2} = 1 + 2\alpha_2 s_0 + O(s_0^2), \tag{5.86}$$

$$\alpha_2 = -\sum_{n=1}^{\infty} \frac{\Sigma'(n)}{\Sigma(n)}. \tag{5.87}$$

Der Beitrag zur Freien Energie ist also nahe der kritischen Temperatur gegeben durch

$$-\beta F_r = -qK + 2qK \int_0^\pi \frac{d\theta}{\pi} \frac{-s_0 \Sigma'(0)}{1 - e^{(\nu+\alpha_1+\alpha_2)2s_0}}. \tag{5.88}$$

Führt man noch eine Variablensubstitution

$$\phi(\theta) = e^{-\nu(\theta)} e^{-(\alpha_1+\alpha_2)} \tag{5.89}$$

durch, so ergibt sich

$$-\beta F_r = -qK + \frac{4}{\pi} qK^2 (1+p) \sinh 2qK \left(\sqrt{z_1} + \frac{1}{\sqrt{z_1}}\right) \left(\sqrt{z_4} - \frac{1}{\sqrt{z_4}}\right) e^{\alpha_1+\alpha_2} \tilde{I}(\delta) \tag{5.90}$$

mit $\delta = -2s_0$ (5.84) als Maß für die Abweichung vom kritischen Punkt;

$$\tilde{I}(\delta) = \int_0^{\phi_0} d\phi \frac{\delta}{1 - \phi^\delta}. \tag{5.91}$$

ϕ_0 ist klein und unabhängig von s_0.
Das nichtanalytische Verhalten der Freien Energie bei $T = T_c$ läßt sich an $\tilde{I}(\delta)$ ablesen; wir folgen der Darstellung von McCoy und Wu [17]:
Das singuläre Verhalten im Integranden stammt von einer Umgebung von 0.
$\tilde{I}$ hat dasselbe analytische Verhalten wie

$$I(\delta) = \int_0^1 d\phi \left(\frac{\delta}{1 - \phi^\delta} + \frac{1}{\ln \phi}\right), \tag{5.92}$$

weil der Grenzwert bei 1 existiert.
Wegen

$$I(\delta) = \delta + I(-\delta) \tag{5.93}$$

braucht nur der Fall $\delta > 0$ betrachtet zu werden. Mit $\phi = e^{-\frac{\xi}{\delta}}$ ergibt sich Binet's Integraldarstellung der Ψ-Funktion ([16],p.18):

$$I(\delta) = \int_0^\infty d\xi e^{-\frac{\xi}{\delta}} \left(\frac{1}{1 - e^{-\xi}} - \frac{1}{\xi}\right) = \ln \delta - \Psi(\frac{1}{\delta}). \tag{5.94}$$

Die asymptotische Entwicklung der Ψ-Funktion ([16],p.47) führt auf

$$I(\delta) = \frac{1}{2}\delta + \sum_{n=1}^\infty B_{2n} \frac{\delta^{2n}}{2n}. \tag{5.95}$$

Dabei sind $\Psi(z) = \frac{\Gamma'(z)}{\Gamma(z)}$, B_n sind die Bernoullizahlen.
Die Freie Energie ist also eine unendlich oft differenzierbare Funktion von T auch bei $T = T_c$. Jedoch ist sie bei $T = T_c$ nicht analytisch, weil die Reihe (5.95) für alle $\delta \neq 0$ divergiert.
Dieses Ergebnis rechtfertigt die obige Definition der kritischen Temperatur.

Kapitel 6

Der KDP-Fall

Die Methode aus dem letzten Kapitel ist nicht ohne weiteres auf den KDP-Fall zu übertragen (siehe Anhang B). Im deterministischen Fall kann man jedoch eine geschlossene Lösung für die Freie Energie angeben. Es wird deshalb das kritische Verhalten in diesem Fall untersucht.

6.1 Exakte Lösung für deterministische Unordnung

Die Zustandssumme des modifizierten KDP-Modells (4.12) lautet:

$$Z = \prod_{\theta>0} \left(\prod_m \omega_5(m)\omega_7(m) \right) \Delta_M(\theta).$$

Im thermodynamischen Limes gilt dann für die freie Energie:

$$\begin{aligned} -\beta F &= \lim_{\substack{M\to\infty \\ N\to\infty}} \frac{1}{MN} \ln Z \qquad (6.1) \\ &= \frac{1}{2} \lim_{M\to\infty} \frac{1}{M} \sum_m \ln \omega_5\omega_7 + \lim_{\substack{N\to\infty \\ M\to\infty}} \frac{1}{MN} \sum_{\theta>0} \Delta_M(\theta) \\ &=: \frac{1}{2} < \ln \omega_5\omega_7 > + \frac{1}{4\pi} \int_0^{2\pi} d\theta \lim_{M\to\infty} \frac{1}{M} \ln \Delta_M(\theta). \end{aligned}$$

Beim modifizierten KDP-Modell kann auch im inhomogenen Fall ein geschlossener Ausdruck für die Zustandssumme angegeben werden. Wir betrachten folgende zum KDP-Modell gehörige Determinante:

$$\Delta_n = \begin{vmatrix} |\alpha_1|^2 + \omega_0^2 & \omega_1\alpha_1 & 0 & \cdots & \cdots & 0 \\ \omega_1\alpha_1^* & |\alpha_2|^2 + \omega_1^2 & \omega_2\alpha_2 & \ddots & & \vdots \\ 0 & \omega_2\alpha_2^* & |\alpha_3|^2 + \omega_2^2 & \omega_3\alpha_3 & \ddots & \vdots \\ \vdots & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots & 0 \\ \vdots & & \ddots & \omega_{n-2}\alpha_{n-2}^* & |\alpha_{n-1}|^2 + \omega_{n-2}^2 & \omega_{n-1}\alpha_{n-1} \\ 0 & \cdots & \cdots & 0 & \omega_{n-1}\alpha_{n-1}^* & |\alpha_n|^2 + \omega_{n-1}^2 \end{vmatrix}. \qquad (6.2)$$

Es gilt:

$$\Delta_n = \prod_{i=0}^{n-1} \omega_i^2 + |\alpha_n|^2 \Delta_{n-1}.$$

Der Beweis gelingt leicht unter Zuhilfenahme der Rekursionsformel:

$$\Delta_{n+1} = (|\alpha_{n+1}|^2 + \omega_n^2)\Delta_n - \omega_n^2 |\alpha_n|^2 \Delta_{n-1}, \tag{6.3}$$

$$\Delta_{-1} = 0, \quad \Delta_0 = 1.$$

$$\begin{aligned} \Delta_{n+1} &= (|\alpha_{n+1}|^2 + \omega_n^2)(\prod_{i=0}^{n-1} \omega_i^2 + |\alpha_n|^2 \Delta_{n-1}) - \omega_n^2 |\alpha_n|^2 \Delta_{n-1} \\ &= \prod_{i=0}^{n} \omega_i^2 + |\alpha_{n+1}|^2 (\prod^{n-1} \omega_i^2 + |\alpha_n|^2 \Delta_{n-1}) \\ &= \prod_{i=0}^{n} \omega_i^2 + |\alpha_{n+1}|^2 \Delta_n. \end{aligned} \tag{6.4}$$

Analog zeigt man

$$\begin{gathered} \Delta^n = \prod_n^N |\alpha_i|^2 - \omega_{n-1}^2 \Delta^{n+1} \\ \Delta^{N+1} = 1 \qquad \Delta^{N+2} = 0 \end{gathered} \tag{6.5}$$

Dabei sind Δ^n die Unterdeterminanten, die von Zeile n bis Zeile N laufen.
Etwas komplizierter ist der Fall periodischer Randbedingungen: Berechnet werden soll die Determinante

$$\Delta_n = \begin{vmatrix} |\alpha_1|^2 + \omega_0^2 & \omega_1\alpha_1 & 0 & \cdots & 0 & \omega_n\alpha_n^* \\ \omega_1\alpha_1^* & |\alpha_2|^2 + \omega_1^2 & \omega_2\alpha_2 & \ddots & & \vdots \\ 0 & \omega_2\alpha_2^* & |\alpha_3|^2 + \omega_2^2 & \omega_3\alpha_3 & \ddots & \vdots \\ 0 & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots & 0 \\ \vdots & & \ddots & \omega_{n-2}\alpha_{n-2}^* & |\alpha_{n-1}|^2 + \omega_{n-2}^2 & \omega_{n-1}\alpha_{n-1} \\ \omega_n\alpha_n & \cdots & \cdots & 0 & \omega_{n-1}\alpha_{n-1}^* & |\alpha_n|^2 + \omega_{n-1}^2 \end{vmatrix}. \tag{6.6}$$

Behauptung: Es gilt

$$\Delta_n = \left| \prod \alpha_i + (-1)^n \prod \omega_i \right|^2. \tag{6.7}$$

Die Reihenfolge der Kopplungen spielt also physikalisch keine Rolle! Dies ist anders als im allgemeinen „free-fermion“- Fall (siehe [20, 26]).

Der Beweis ist komplizierter, weil die Einträge links unten und rechts oben in der Determinante nicht verschwinden. Wenn man die $N \times N$ Determinante aber entwickelt, kann man das Problem auf das vorherige zurückführen. Es gilt:

$$\left|\begin{array}{ccc} a & b & h \\ c & & \\ & \boxed{\text{A}} & \\ & & g \\ j & f & e \end{array}\right| \tag{6.8}$$

$$= (ae - hj)\left|\boxed{\text{A}}\right| - agf\left|\boxed{\text{A}}\right| - bce\left|\boxed{\text{A}}\right|$$

$$+bcfg\left|\boxed{\text{A}}\right| + (-1)^N cfh\left|\boxed{\text{A}}\right| + (-1)^N bgj\left|\boxed{\text{A}}\right|.$$

Dabei sind

$$\left|\boxed{\text{A}}\right| = \begin{vmatrix} |\alpha_2|^2 + \omega_1^2 & \omega_2\alpha_2 & 0 & \cdots & \cdots & 0 \\ \omega_2\alpha_2^* & |\alpha_3|^2 + \omega_2^2 & \omega_3\alpha_3 & \ddots & & \vdots \\ 0 & \omega_3\alpha_3^* & |\alpha_4|^2 + \omega_3^2 & \omega_4\alpha_4 & \ddots & \vdots \\ \vdots & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots & 0 \\ \vdots & & \ddots & \omega_{n-3}\alpha_{n-3}^* & |\alpha_{n-2}|^2 + \omega_{n-3}^2 & \omega_{n-2}\alpha_{n-2} \\ 0 & \cdots & \cdots & 0 & \omega_{n-2}\alpha_{n-2}^* & |\alpha_{n-1}|^2 + \omega_{n-2}^2 \end{vmatrix}. \tag{6.9}$$

Die Striche bedeuten, daß die jeweilige Spalte bzw. Zeile von A gestrichen ist. Die zwei Dreiecksmatrizen lassen sich explizit angeben:

$$\left|\boxed{\text{A}}\right| = \prod_{i=2}^{N-1} \omega_i\alpha_i^*, \qquad \left|\boxed{\text{A}}\right| = \prod_{i=2}^{N-1} \omega_i\alpha_i. \tag{6.10}$$

Die restlichen Matrizen haben dieselbe Struktur wie A:

$$\left|\boxed{\text{A}}\right| \text{ enthält } \omega_2^2 \cdots \omega_{N-3}^2 \text{ bzw. } |\alpha_3|^2 \cdots |\alpha_{N-2}|^2, \tag{6.11}$$

$$\left|\boxed{\text{A}}\right| \text{ enthält } \omega_2^2 \cdots \omega_{N-2}^2 \text{ bzw. } |\alpha_3|^2 \cdots |\alpha_{N-1}|^2,$$

$$\left|\boxed{\text{A}}\right| \text{ enthält } \omega_1^2 \cdots \omega_{N-3}^2 \text{ bzw. } |\alpha_2|^2 \cdots |\alpha_{N-2}|^2.$$

Betrachte nun die ersten vier Summanden:

$$[(|\alpha_1|^2+\omega_N^2)(|\alpha_N|^2+\omega_{N-1}^2)-\omega_N^2\,|\alpha_N|^2]\,\Big|\boxed{\text{A}}\Big| \tag{6.12}$$

$$-(|\alpha_1|^2+\omega_N^2)\omega_{N-1}^2\,|\alpha_{N-1}|^2\,\Big|\boxed{\boxed{\text{A}}}\Big| \;-\;\omega_1^2\,|\alpha_1|^2\,(|\alpha_N|^2+\omega_{N-1}^2)\,\Big|\boxed{\boxed{\text{A}}}\Big|$$

$$+\omega_1^2\,|\alpha_1|^2\,\omega_{N-1}^2\,|\alpha_{N-1}|^2\,\Big|\boxed{\boxed{\text{A}}}\Big|$$

Wende die Rekursionsformel für A an:

$$\Big|\boxed{\text{A}}\Big| = \prod_{i=2}^{N-1}|\alpha_n|^2+\omega_1^2\,\Big|\boxed{\boxed{\text{A}}}\Big|, \tag{6.13}$$

$$\Big|\boxed{\text{A}}\Big| = \prod_{i=1}^{N-2}\omega_i^2+|\alpha_2|^2\,\Big|\boxed{\boxed{\text{A}}}\Big|,$$

$$\Big|\boxed{\boxed{\text{A}}}\Big| = \prod_{i=2}^{N-2}\omega_i^2+|\alpha_{N-1}|^2\,\Big|\boxed{\boxed{\text{A}}}\Big|.$$

Jetzt läßt sich die Determinante berechnen:

$$[(|\alpha_1|^2+\omega_N^2)(|\alpha_N|^2+\omega_{N-1}^2)-\omega_N^2\,|\alpha_N|^2]\,\Big|\boxed{\text{A}}\Big| \tag{6.14}$$

$$-(|\alpha_1|^2+\omega_N^2)\omega_{N-1}^2\Big(\Big|\boxed{\text{A}}\Big| - \prod_{i=1}^{N-2}\omega_i^2\Big)$$

$$-\omega_1^2\,|\alpha_1|^2\,(|\alpha_N|^2+\omega_{N-1}^2)\,\Big|\boxed{\boxed{\text{A}}}\Big|$$

$$+\omega_1^2\,|\alpha_1|^2\,\omega_{N-1}^2\Big(\Big|\boxed{\boxed{\text{A}}}\Big| - \prod_{i=2}^{N-2}\omega_i^2\Big)$$

$$
\begin{aligned}
&= |\alpha_N|^2 |\alpha_1|^2 \Big(\Big| \boxed{\text{A}} \Big| - \omega_1^2 \Big| \boxed{\boxed{\text{A}}} \Big| \Big) \\
&\quad + (|\alpha_1|^2 + \omega_N^2) \prod_{i=1}^{N-1} \omega_i^2 - |\alpha_1|^2 \prod_{i=1}^{N-1} \omega_i^2 \\
&= \prod |\alpha_i|^2 + \prod \omega_i^2 .
\end{aligned}
$$

Zusammen mit den Beiträgen aus den oberen Dreiecksmatrizen ergibt sich die Behauptung.

Bemerkungen

Da die Fouriertransformation nur für gerades N durchgeführt wurde, gilt $(-1)^N = 1$.
Der Ausdruck für die Determinante ist unabhängig von der Anordnung der Kopplungen.
Wenn man die Kopplungen als unabhängige Zufallsvariable modelliert, benutzt man die Determinantenrekursionsformel (6.3). Es ist zu zeigen, daß im thermodynamischen Limes die Ergebnisse bezüglich dieser unterschiedlichen Randbedingungen miteinander übereinstimmen.

Der Nachweis ist einfacher als im Isingfall, weil die Ausdrücke für die Zustandssumme explizit bekannt sind. Bezeichne das exakte Ergebnis mit Δ_N, das aus der Rekursionsformel erhaltene mit Δ_N^{rek}.
Maßgeblich für den thermodynamischen Limes ist der Ausdruck

$$
\lim_{N\to\infty} \frac{1}{N} \ln \Delta_N = \lim_{N\to\infty} \ln \sqrt[N]{\Delta_N}
$$

Betrachte also im folgenden $\lim_{N\to\infty} \sqrt[N]{\Delta_N}$.
Nimmt man an, daß folgende Grenzwerte existieren:

$$
\lim_{N\to\infty} \sqrt[N]{\Big|\prod \alpha_i\Big|^2} = \alpha, \lim_{N\to\infty} \sqrt[N]{\Big|\prod \omega_i\Big|^2} = \omega,
$$

so ergibt sich:

$$
\lim_{n\to\infty} \sqrt[N]{\Delta_N} = \lim_{N\to\infty} \sqrt[N]{\Big|\prod \alpha_i + \prod \omega_i\Big|^2} = \max(\alpha, \omega).
$$

Zum Vergleich mit Δ_N^{rek} setze o.B.d.A. $\omega_i = 1$. Dann sind

$$
\Delta_N = \Big|1 + \prod \alpha_i\Big|^2, \qquad \Delta_N^{rek} = \sum_{j=0}^{N} \prod_{i=1}^{j} \alpha_i^2 .
$$

Sei nun o.B.d.A. $\alpha \neq 0, \epsilon > 0$. Es gilt dann für alle $n \geq n_0(\epsilon)$:

$$
\begin{aligned}
\alpha^2 - \epsilon \leq \quad & \sqrt[n]{\textstyle\prod \alpha_i^2} \quad \leq \alpha^2 + \epsilon \\
\Leftrightarrow (\alpha_-^2)^n \leq \quad & \textstyle\prod^n \alpha_i^2 \quad \leq (\alpha_+^2)^n .
\end{aligned}
\tag{6.15}
$$

Mit Hilfe der geometrischen Reihe kann man abschätzen:

$$\alpha_0(n_0) + \frac{(\alpha_-^2)^{n_0} - (\alpha_-^2)^{N+1}}{1-\alpha_-^2} \geq \Delta_N^{rek} = \sum_{j=0}^{n_0-1} \prod_{i=1}^{j} \alpha_i^2 + \sum_{j=n_0}^{N} \prod_{i=1}^{j} \alpha_i^2 \leq \alpha_0(n_0) + \frac{(\alpha_+^2)^{n_0} - (\alpha_+^2)^{N+1}}{1-\alpha_+^2}. \tag{6.16}$$

$$\Rightarrow \max(1, \alpha_-^2) \leq \lim_{N\to\infty} \sqrt[N]{\Delta_N^{rek}} \leq \max(1, \alpha_+^2) \text{ für alle } \epsilon. \tag{6.17}$$

$$\Rightarrow \lim_{N\to\infty} \sqrt[N]{\Delta_N^{rek}} = \lim_{N\to\infty} \sqrt[N]{\Delta_N} = \max(1, \alpha^2).$$

6.2 Kritisches Verhalten

6.2.1 Homogener Fall

Zunächst wird das kritische Verhalten im homogenen Fall untersucht. Es gilt (6.1):

$$-\beta F = -\frac{1}{4\pi} \int_0^{2\pi} \ln a \max(1, b(\phi)), \tag{6.18}$$

$$a = \omega_4^2, \qquad b(\phi) = \left(\frac{\omega_2}{\omega_4}\right)^2 + \left(\frac{\omega_3}{\omega_4}\right)^2 - 2\frac{\omega_2}{\omega_4}\frac{\omega_3}{\omega_4}\cos\phi.$$

Entscheidend für das kritische Verhalten ist das Verschwinden des Betrages im Ausdruck $\max(1, b) = \frac{1}{2}(1+b+|1-b|)$. Die Funktion $b(\phi)$ hat für $\beta = 0$ zwei Schnittpunkte mit der Geraden $f(\phi) = 1$. Es zeigt sich, daß das modifizierte KDP-Modell nur dort kritisch ist, wo beide Punkte zusammenfallen [3, 26]. Dies ist nur für $\phi_c = 0$ oder π der Fall. Für die Singularität in der spezifischen Wärme ist im Integranden nur eine Umgebung des kritischen Punktes relevant.
Betrachte zur Lokalisierung der kritischen Temperatur die Ungleichung

$$\left(\frac{\omega_2}{\omega_4} - \frac{\omega_3}{\omega_4}\right)^2 \leq b(\phi) \leq \left(\frac{\omega_2}{\omega_4} + \frac{\omega_3}{\omega_4}\right)^2 \tag{6.19}$$

im Limes $\beta \to \infty$.
Der Ausdruck auf der linken Seite wächst monoton von 0, der Ausdruck auf der rechten Seite fällt monoton von 4 gegen $\left(\max\left(\frac{\omega_2}{\omega_4}, \frac{\omega_3}{\omega_4}\right)\right)^2$.
Die kritische Temperatur ist also definiert über:

$$\begin{aligned} \omega_4 &= \omega_2 + \omega_3 \qquad \text{im Fall } \omega_4 > \max(\omega_2, \omega_3) \qquad (\phi_c = \pi), \\ \omega_4 &= |\omega_2 - \omega_3| \qquad \text{im Fall } \omega_4 < \max(\omega_2, \omega_3) \qquad (\phi_c = 0). \end{aligned} \tag{6.20}$$

Im Fall $\omega_4 = \max(\omega_2, \omega_3)$ weist das System kein kritisches Verhalten auf.
Entwickle nun $b(\phi)$ um den kritischen Punkt.
Sei $\omega_4 > \max(\omega_2, \omega_3)$ bzw. $e_4 < \min(e_2, e_3)$. Dann ist $\phi_c = \pi$, und eine Taylorentwicklung von b ergibt

$$b(\phi,\beta) = 1 + b_\beta(\beta-\beta_c) + \frac{1}{2}b_{\phi\phi}(\phi-\pi)^2 + O((\beta-\beta_c)^2,(\phi-\pi)^3), \tag{6.21}$$

$$b_{\phi\phi} = -2\frac{\omega_2\omega_3}{\omega_4^2},$$

$$b_\beta = -2(e_2-e_4)\frac{\omega_2^2}{\omega_4^2} - 2(e_3-e_4)\frac{\omega_3^2}{\omega_4^2} - 2(e_2+e_3-2e_4)\frac{\omega_2\omega_3}{\omega_4^2},$$

$$b_{\beta\beta} = 4(e_2-e_4)^2\frac{\omega_2^2}{\omega_4^2} + 4(e_3-e_4)^2\frac{\omega_3^2}{\omega_4^2} + 2(e_2+e_3-2e_4)^2\frac{\omega_2\omega_3}{\omega_4^2}.$$

Im hier betrachteten Fall ist $b_\beta < 0$.

Im Fall $\beta - \beta_c > 0$ ist $b(\phi,\beta)$ immer kleiner als 1, d.h. die Freie Energie geht wie $(\beta-\beta_c)$.
Betrachte nun den Fall $\beta - \beta_c < 0$.
Nahe des kritischen Punktes läuft die Integration nur über ein Parabelstück in einer Umgebung von π: $\phi \in (\pi-\phi_0, \pi+\phi_0)$ mit

$$\phi_0 = \sqrt{2\frac{b_\beta}{b_{\phi\phi}}}\sqrt{\beta_c-\beta}. \tag{6.22}$$

Entwickelt man den Logarithmus, ergibt sich der das singuläre Verhalten bestimmende Anteil der Freien Energie zu

$$\begin{aligned} -\beta F &\simeq \int_{\pi-\phi_0}^{\pi+\phi_0}\left(b_\beta(\beta-\beta_c) + \frac{1}{2}b_{\phi\phi}(\phi-\pi)^2\right) \\ &= -b_\beta\sqrt{2\frac{b_\beta}{b_{\phi\phi}}}(\beta_c-\beta)^{\frac{3}{2}} + \frac{1}{3}b_{\phi\phi}\sqrt{\frac{2b_\beta}{b_{\phi\phi}}}^3(\beta_c-\beta)^{\frac{3}{2}}. \end{aligned} \tag{6.23}$$

Die Freie Energie enthält also Terme in $(\beta_c-\beta)^{\frac{3}{2}}$. Es ergibt sich für die spezifische Wärme damit ein kritischer Exponent von $\frac{1}{2}$.

Ein Spezialfall des Modells tritt dann auf, wenn b_β am kritischen Punkt verschwindet. Dies kann für antiferromagnetische Kopplungen eintreten. Die Taylorentwicklung muß dann einen Term weiter angesetzt werden. Für ϕ_0 folgt $\phi_0 = \sqrt{-\frac{b_{\beta\beta}}{b_{\phi\phi}}}|\beta-\beta_c|$, so daß die Freie Energie in diesem Fall wie $(\beta-\beta_c)^2$ geht.
Die Singularität in der spezifischen Wärme verschwindet dann.

6.2.2 Inhomogener Fall

Im deterministischen Fall gelten ähnliche Formeln:
Mit den Bezeichnungen aus dem letzten Abschnitt gilt Formel (6.18) mit

$$a = \lim_{N\to\infty}\sqrt[N]{\prod_{i=1}^N \omega_4^2(i)}, \qquad b(\phi) = \lim_{N\to\infty}\sqrt[N]{\prod_{i=1}^N b_i(\phi)}. \tag{6.24}$$

Wiederum hat $b(\phi)$ mit der Geraden $f(\phi)=1$ für $\beta = 0$ zwei Schnittpunkte. (Die einzelnen b_i sind in den Intervallen $(0,\pi)$ und $(\pi,2\pi)$ monotone Funktionen.)

Relevant für das singuläre Verhalten im Integranden sind die Mittelwerte über die Kopplungen: Die kritische Temperatur ist definiert über

$$1 = \prod_{i=1}^{N} b_i(\pi, \beta_c) \text{ für } < e_4 > > < \min(e_2, e_3) >, \tag{6.25}$$

$$1 = \prod_{i=1}^{N} b_i(0, \beta_c) \text{ für } < e_4 > < < \min(e_2, e_3) >,$$

$$< f(e_k) >= \frac{1}{N} \sum_{i=1}^{N} f(e_k(i)).$$

Es gilt dann im ersteren Fall

$$\begin{aligned} b_{\phi\phi} &= \lim_{N\to\infty} \frac{1}{N} \sum_{j=1}^{N} \partial_\phi^2 \ln b_j(\pi) \\ &= -\lim_{N\to\infty} \frac{1}{N} \sum \frac{2\omega_2\omega_3}{\omega_4^2}, \\ b_\beta &= \frac{1}{N} \sum_j \partial_\beta \ln b_j(\pi) \\ &= -\frac{1}{N} \sum_j 2(e_2 - e_4)\frac{\omega_2^2}{\omega_4^2} + 2(e_3 - e_4)\frac{\omega_3^2}{\omega_4^2} + 2(e_2 + e_3 - 2e_4)\frac{\omega_2\omega_3}{\omega_4^2}, \\ b_{\beta\beta} &= \frac{1}{N} \sum_j \partial_\beta^2 \ln b_j(\pi) \\ &= \frac{1}{N} \sum 4(e_2 - e_4)^2\frac{\omega_2^2}{\omega_4^2} + 4(e_3 - e_4)^2\frac{\omega_3^2}{\omega_4^2} + 2(e_2 + e_3 - 2e_4)^2\frac{\omega_2\omega_3}{\omega_4^2}. \end{aligned} \tag{6.26}$$

Es zeigen sich dieselben Effekte wie im homogenen Fall: die Irrelevanz der Reihenfolge der Kopplungen bezüglich des kritischen Verhaltens sowie das Verschwinden der kritischen Singularität bei spezieller Wahl antiferromagnetischer Kopplungen.

Das Verhalten der Freien Energie für Unordnung mit unabhängigen Zufallsvariablen konnte bisher nicht geklärt werden. Eine Rechnung in dieser Richtung ist im Anhang B skizziert.
Obwohl das thermodynamische Verhalten des inhomogenen modifizierten KDP-Modells im deterministischen Fall unabhängig von der Anordnung der Kopplungen ist, ist gemäß dem Harriskriterium [21, 26] davon auszugehen, daß das kritische Verhalten sich qualitativ ändert.

Kapitel 7

Zusammenfassung und Ausblick

In der vorliegenden Arbeit wurde der „free-fermion“-Fall des inhomogenen 8-Vertex-Modells untersucht, ausgehend von Methoden in [14].
Im Spezialfall, der beim homogenen System in die Onsager-Klasse fällt, wird für den betrachteten Fall von „layered quenched disorder“ die logarithmische Singularität in der spezifischen Wärme abgeschwächt und bleibt am kritischen Punkt endlich; die Freie Energie ist dort nichtanalytisch. Dieses Verhalten ist in Übereinstimmung mit den Studien von McCoy und Wu [17] am Isingmodell. Im Spezialfall mit kritischem Exponenten $\alpha = \frac{1}{2}$ in der spezifischen Wärme zeigt sich für deterministische Unordnung keine qualitative Änderung des kritischen Verhaltens.
Eine Lösung im Fall zufällig verteilter Kopplungen steht noch aus; das Harriskriterium [21, 26] sagt voraus, daß sich das kritische Verhalten ändert, denn der Koeffizient α ist positiv.
Eine weitere noch offene Frage ist das Verhalten im Onsager-Fall unter Frustration, siehe auch [14]. Es wäre interessant zu untersuchen, ob man die Kopplungen so wählen kann, daß man zwischen beiden Universalitätsklassen extrapolieren kann [26].
Schließlich können die Methoden von [23] auf das betrachtete Modell übertragen werden; dies würde auch für das modifizierte KDP-Modell ein exaktes Ergebnis mit 2D-Unordnung im Falle unabhängiger Zufallsvariablen ergeben.

Danksagungen

An erster Stelle möchte ich mich bei Markus Simon für die intensive und lehrreiche Zusammenarbeit bedanken. Prof. Flume gilt mein Dank für die Themenstellung, ständige Diskussionsbereitschaft, Anregungen und zahlreiche Literaturhinweise. Simone Artz und Hagen Storch danke ich für fruchtbare Diskussionen. Für ein gutes Arbeitsklima auf unserem Institutszimmer bedanke ich mich außerdem bei Lars Jaeger, Michael Pröbsting und Karim Yildirim.

Anhang A

Rechenregeln für Grassmannvariablen

Eine einzelne Grassmannvariable η ist definiert durch $\eta^2 = 0$. Integration über eine Variable η ist definiert als $\int d\eta\, \eta = 1$ und $\int d\eta\, 1 = 0$.
Hat man mehrere Variablen (z.B. η, ψ), so fordert man, daß sie gegenseitig antikommutieren: $\eta\psi + \psi\eta = 0$.
Das Integral über einen Ausdruck in mehreren Grassmannvariablen wird so definiert, daß die zu integrierende Variable nach vorn gezogen und dann wie eine einzelne Variable integriert wird.
Beispiel: $\int d\psi\, \eta\psi = -\int d\psi\, \psi\eta = -\eta, \quad \int d\psi d\eta\, \psi\eta = -1, \quad \int d\psi\, \eta = 0$.
Man überlegt sich leicht, daß die oben definierte Integration damit übereinstimmt, die Differentiale als Grassmannvariablen zu betrachten und unmittelbar vor den Ausdruck das Differential zu ziehen, das gerade den ersten Faktor integriert.

Es folgt eine Zusammenstellung der Rechenregeln mit linearen Transformationen: Sei $\phi(n) = \sum a(n,n')\psi(n')$ oder kurz $\phi = A\psi$. Außerdem sei $F(\phi)$ ein Monom in $\phi(n)$. Es gilt

$$\int D\phi F(\phi) = \det A \int D\psi F(A\psi) \qquad D\phi = \prod_n d\phi(n).$$

Die Grassmannvariablen sind in der Reihenfolge der Indizierung angeordnet.
$F(A\psi)$ ist nämlich ein Ausdruck in $\psi(n)$, und die Transformation ist graderhaltend. Betrachte die Terme, die zum Integral beitragen:

$$\begin{aligned} \phi(1)\cdots\phi(n) &= (\sum_{i_1} a(1,i_1)\psi(i_1))\cdots(\sum_{i_n} a(n,i_n)\psi(i_n)) \\ &= \sum_{i_1,\ldots,i_n} a(1,i_1)\cdots a(n,i_n)\psi(i_1)\cdots\psi(i_n) \\ &= \det A\, \psi(1)\cdots\psi(n). \end{aligned} \tag{A.1}$$

Nun kann die diskrete Fouriertransformation erklärt werden: Man benutzt

$$\begin{gathered} \tfrac{1}{N}\textstyle\sum_k e^{\imath\theta_k(n-m)} = \delta_{n,m}, \\ \theta_k = \tfrac{2\pi k}{N}, \qquad \theta_k \in (-\pi,\pi), \qquad k = -\left(\tfrac{N}{2}-\tfrac{1}{2}\right),\cdots,\tfrac{N}{2}-\tfrac{1}{2}. \end{gathered} \tag{A.2}$$

Beweis: $\sum_{n=0}^{N-1} q^n = \frac{1-q^N}{1-q} \quad (q \neq 1)$. Also haben wir $\sum_{n=0}^{N-1} e^{\frac{k2\pi\imath n}{N}} = 0$. Legt man die Wurzeln symmetrisch um den Nullpunkt, erhält man $0 = \sum_{-(\frac{N}{2}-\frac{1}{2})}^{\frac{N}{2}-\frac{1}{2}} e^{\frac{2\pi\imath n}{N}}$. Die Null ist Wurzel für N ungerade.

Die Fouriertransformation ist erklärt als

$$\psi(\theta) := \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_n \psi(n) e^{\imath n\theta} \quad n = 1, \ldots, N.$$

Man rechnet leicht nach, daß gilt: $\sum_n \psi_1(n)\psi_2(n+m) = \sum_\theta \psi_1(\theta)\psi_2(-\theta)e^{\imath m\theta}$. Definiert man $\psi_i(-\theta) = \psi_i^*(\theta)$, so ergibt sich im Fall N gerade:

$$\sum_n \psi_1(n)\psi_2(n+m) = \sum_{\theta>0} \psi_1^*(\theta)\psi_2(\theta)e^{-\imath m\theta} - \psi_2^*(\theta)\psi_1(\theta)e^{\imath m\theta}.$$

Die Determinante der Fouriertransformation hat den Betrag eins, da die Fouriertransformation eine unitäre Transformation ist:

Indiziere die verschiedenen θ mit m, $\quad m = 1 \ldots N$ und schreibe die Matrixelemente von A als

$$A_{n,m} = e^{\imath n\theta_m}. \tag{A.3}$$

Aufgrund der Orthogonalitätsrelation gilt

$$A_{n,j}A^{*T}_{j,m} = A_{n,j}A^*_{m,j} = \sum_j e^{\imath n\theta_j} e^{-\imath m\theta_j} = \sum_j e^{\imath\theta_j(n-m)} = \delta_{n,m}. \tag{A.4}$$

Die Determinante von A ist sogar rein imaginär:

$$\det A = \sum_{\pi\in S_N} (-1)^\pi e^{\imath(1\cdot\theta_{\pi(1)}+\cdots+N\cdot\theta_{\pi(N)})}. \tag{A.5}$$

Zu jedem Summanden gibt es genau einen mit entgegengesetzter Phase: Da die θ symmetrisch um 0 liegen, braucht man solche mit gleichem Betrag nur zu vertauschen.
Die entsprechenden Permutationen haben gerade unterschiedliche Parität, so daß man je zwei Terme zusammenfassen kann zu $2\imath\sin\theta$.
Fazit: $\det A = \pm\imath$.

Da in den betrachteten Fällen über jeweils vier Variablen integriert wird, spielt die Determinante keine Rolle: $(\det A)^4 = 1$.

Zum Schluß wird noch gezeigt, daß gilt:

$$\int \prod_k d\bar\eta_k d\eta_k \exp(-\bar\eta_i A_{ij}\eta_j) = \det A \tag{A.6}$$

Betrachte den Ausdruck

$$\exp(\bar\eta_i A_{ij}\eta_j) = \prod_{i,j}(1 + A_{ij}\bar\eta_i\eta_j) \tag{A.7}$$

Zum Integral tragen folgende Terme aus (A.7) bei:

$$\begin{aligned} & \sum_{\pi\in S_N} A_{1,\pi(1)}\bar\eta_1\eta_{\pi(1)}\cdots A_{N,\pi(N)}\bar\eta_N\eta_{\pi(N)} \\ = \quad & (-1)^{\frac{N(N-1)}{2}} \sum_{\pi\in S_N} A_{1,\pi(1)}\cdots A_{N,\pi(N)}\bar\eta_1\cdots\bar\eta_N\eta_{\pi(1)}\cdots\eta_{\pi(N)} \end{aligned}$$

$$
\begin{aligned}
&= (-1)^{\frac{N(N-1)}{2}} \left(\sum_{\pi \in S_N} (-1)^{\pi} A_{1,\pi(1)} \cdots A_{N,\pi(N)} \right) \bar{\eta}_1 \cdots \bar{\eta}_N \eta_1 \cdots \eta_N \\
&= (-1)^{\frac{N(N-1)}{2}} \det A \bar{\eta}_1 \cdots \bar{\eta}_N \eta_1 \cdots \eta_N \\
&= \det A \bar{\eta}_1 \eta_1 \cdots \bar{\eta}_N \eta_N. \qquad \text{(A.8)}
\end{aligned}
$$

Bei der Integration tritt also noch ein Faktor $(-1)^N$ auf, der gerade das obige Minuszeichen ergibt.

Anhang B

Die Integralgleichung für das KDP-Modell

Die Zustandssumme des modifizierten KDP-Modells (4.12) lautet:

$$Z = \prod_{\theta>0} \left(\prod_m \omega_5(m)\omega_7(m) \right) \Delta_M(\theta).$$

Im thermodynamischen Limes gilt dann für die freie Energie:

$$\begin{aligned} -\beta F &= \lim_{\substack{M\to\infty \\ N\to\infty}} \frac{1}{MN} \ln Z \\ &= \frac{1}{2} \lim_{M\to\infty} \frac{1}{M} \sum_m \ln \omega_5\omega_7 + \lim_{\substack{N\to\infty \\ M\to\infty}} \frac{1}{MN} \sum_{\theta>0} \Delta_M(\theta) \\ &=: \frac{1}{2} < \ln \omega_5\omega_7 > + \lim_{N\to\infty} \frac{1}{N} \sum_{\theta>0} \Omega(\theta) \end{aligned} \tag{B.1}$$

mit

$$\begin{aligned} \Omega(\theta) &= \lim_{M\to\infty} \frac{1}{M} \ln \Delta_M \\ &= \lim_{M\to\infty} \frac{1}{M} \sum_{m=1}^{M} \ln \frac{\Delta_m(\theta)}{\Delta_{m-1}(\theta)}. \end{aligned} \tag{B.2}$$

Wegen $\Delta_m(\theta) = \Delta_m(-\theta)$ gilt $\Omega(\theta) = \Omega(-\theta)$ und

$$\lim_{N\to\infty} \frac{1}{N} \sum_{\theta>0} \Omega(\theta) = \frac{1}{2\pi} \int_0^\pi d\theta \Omega(\theta) = \frac{1}{4\pi} \int_0^{2\pi} d\theta \Omega(\theta).$$

Maßgeblich für das thermodynamische Verhalten ist also die Größe $\frac{\Delta_{m+1}}{\Delta_m}$ im Limes $m \to \infty$.
Im folgenden wird für diese Größe eine Rekursionsformel hergeleitet und deren Fixpunkt bestimmt.
Im Fall unabhängiger Zufallsvariablen wird aus der Rekursionsformel eine komplizierte Integralgleichung.
Man wählt die Zufallsverteilung so, daß man die Integralgleichung in eine Differenz-Differentialgleichung umwandeln kann.

Nach einer Möbiustransformation möchte man diese durch Potenzreihenansatz lösen.

Zunächst zur Rekursionsformel: Definiere

$$S_n = \frac{\Delta_{n+1}}{\Delta_n} - a_{n+1}. \tag{B.3}$$

Dann gilt

$$S_n = \frac{\omega_n S_{n-1}}{a_n + S_{n-1}}, \qquad S_0 = \omega_0. \tag{B.4}$$

Die Definition sorgt dafür, daß auf der rechten Seite nur n und $n-1$ auftauchen.

Im homogenen Fall ist die Lösung einfach: Es gilt

$$\begin{gathered} \max(0, \omega - a) \leq S_n \leq \omega, \\ \text{Fixpunkte: } S = 0 \qquad \tfrac{\omega}{a} < 1, \\ S = \omega - a \qquad \tfrac{\omega}{a} > 1. \end{gathered} \tag{B.5}$$

Beweis:
Betrachte die Funktion

$$f(x) = \frac{\omega x}{a + x}, \qquad x \in [\max(0, \omega - a), \omega] := I. \tag{B.6}$$

f ist eine kontrahierende Selbstabbildung des Intervalls I und besitzt den Fixpunkt

$$\begin{aligned} 0 \quad &\text{für} \quad \frac{\omega}{a} < 1, \\ \omega - a \quad &\text{für} \quad \frac{\omega}{a} > 1. \end{aligned} \tag{B.7}$$

Es ist nämlich für $x, y \in I$

$$\begin{aligned} (f(x) - f(y)) &= \frac{\omega a}{(a+x)(a+y)}(x - y) \\ &\leq \begin{cases} \frac{\omega}{a}(x-y) & \frac{\omega}{a} < 1 \\ \frac{a}{\omega}(x-y) & \frac{\omega}{a} > 1 \end{cases}. \end{aligned} \tag{B.8}$$

Außerdem ist

$$\begin{gathered} f(x) - \omega = -\omega \frac{a}{x+a} < 0, \\ f(x) = \frac{\omega}{a+x} x \geq 0, \\ f(x) - (\omega - a) = \frac{a}{x+a}(x - (\omega - a)) \geq 0, \end{gathered} \tag{B.9}$$

also ist f tatsächlich Selbstabbildung.
Man sieht außerdem, daß im Fall $\frac{\omega}{a} < 1$ der stabile Fixpunkt 0 und im Fall $\frac{\omega}{a} > 1$ der stabile Fixpunkt $\omega - a$ auftritt.

Damit gilt $\Omega(\theta) = \max(a, \omega)$ in Übereinstimmung mit dem Ergebnis von Fan und Wu.

Nun seien $J_a(n)$ unabhängige Zufallsvariablen mit gemeinsamer Verteilung $\rho_a(J_a)$; desgleichen $J_\omega(n)$ mit $\rho_\omega(J_\omega)$. Definiert man sich eine Hilfsfunktion

$$D_n(u) :=< \ln\left(S_n - \frac{1}{u}\right) >, \tag{B.10}$$

so erfüllt diese im Limes $N \to \infty$ folgende Integralgleichung:

$$D(u) = \int \rho_a(J_a) dJ_a \rho_\omega(J_\omega) dJ_\omega \ \ln\left(\omega - \frac{1}{u}\right) + D\left(u\frac{\omega}{a} - \frac{1}{a}\right) - D\left(-\frac{1}{a}\right). \tag{B.11}$$

Die im thermodynamischen Limes maßgebliche Größe ist

$$\begin{aligned} \Omega(\theta) &= \lim_{m\to\infty} < \ln \frac{\Delta_m(\theta)}{\Delta_{m-1}(\theta)} > \\ &= \int \rho_a(J_a) dJ_a D\left(-\frac{1}{a}\right). \end{aligned} \tag{B.12}$$

Man wählt nun die Verteilung so, daß man die Integralgleichung in eine Differentialgleichung umwandeln kann.
Die Idee hierbei ist, nach partieller Integration die Ableitung nach der Zufallsvariablen in eine Ableitung nach u umzuwandeln und diese vor das Integral zu ziehen, um dann die ursprüngliche Integralgleichung wieder einzusetzen.

Im folgenden sei das Integral einfach, $\omega = \omega(x)$.
Wähle zunächst eine unsymmetrische Verteilung

$$\rho(x) = \begin{cases} 0 & x < 0 \\ qe^{-x} + p\delta(x) & x \geq 0 \end{cases} \qquad p + q = 1 \ , \tag{B.13}$$

$$\Phi(u,x) := u\frac{\omega(x)}{a} - \frac{1}{a}, \qquad \Psi(u,x) := \left(\omega(x) - \frac{1}{u}\right).$$

Dann lautet die Integralgleichung:

$$D(u) = q\int_0^\infty dx\, e^{-x}[D\circ\Phi(u,x) + \ln\Psi(u,x)] + pD\circ\Phi(u,0) + p\ln\Psi(u,0) - \Omega. \tag{B.14}$$

Nun gelte:

$$\frac{\partial\Phi}{\partial x} = cu\frac{\partial\Phi}{\partial u}, \qquad \frac{\partial\ln\Psi}{\partial x} = c\left(1 + u\frac{\partial\ln\Psi}{\partial u}\right). \tag{B.15}$$

Dann ist

$$\begin{aligned} D(u) &= q\int_0^\infty dx\, e^{-x}\left[D'\circ\Phi\frac{\partial\Phi}{\partial x} + \frac{\partial\ln\Psi}{\partial x}\right] + D\circ\Phi(u,0) + \ln\Psi(u,0) - \Omega \\ &= q\int_0^\infty dx\, e^{-x} cu\left(D'\circ\Phi\frac{\partial\Phi}{\partial u} + \frac{\partial\ln\Psi}{\partial u}\right) + qc + D\circ\Phi + \ln\Psi - \Omega \\ &= qcu\partial_u\left(\int_0^\infty dx\, e^{-x}[D\circ\Phi + \ln\Psi]\right) + qc + D\circ\Phi + \ln\Psi - \Omega. \end{aligned} \tag{B.16}$$

Setzt man die Integralgleichung ein, erhält man

$$D(u) = cu\partial_u[D - pD \circ \Phi - p \ln \Psi] + D \circ \Phi + \ln \Psi - \Omega + qc. \tag{B.17}$$

Setzt man $\omega(x) = \omega_0 e^{cx}$, so ist (B.15) erfüllt.
Die Differentialgleichung verknüpft die Punkte u und $\Phi(u)$. Φ ist eine Möbiustransformation. Man kann durch Komposition einer geeigneten zweiten Transformation $s(y)$ erreichen, daß gilt:

$$\Phi \circ s(y) = s(ky) \qquad k \in \mathrm{R}. \tag{B.18}$$

Die Differentialgleichung in den neuen Variablen nimmt dann eine einfachere Form an.
Die noch vorhandenen Logarithmen werden durch Addition einer weiteren Funktion $r(y)$ aus der Differentialgleichung eliminiert.
Die neue Funktion $G(y) = D \circ s(y) + r(y)$ muß im Bereich, um den entwickelt wird, wohldefiniert sein.

I.Fall: $\omega - a < 0$

Eine Lösung von (B.18) ist

$$s^I(y) = \alpha y + \frac{1}{\omega - a}. \tag{B.19}$$

Es gilt :

$$\Phi \circ s^I(y) = s^I\left(y\frac{\omega}{a}\right). \tag{B.20}$$

Damit folgt

$$\Psi \circ s^I(y) = a\frac{s^I(y\frac{\omega}{a})}{s^I(y)}. \tag{B.21}$$

Definiert man

$$r^I(y) = \ln\left(\frac{s^I(y)}{\beta}\right), \tag{B.22}$$

so verschwinden in der Differentialgleichung für $G(y)$ die Terme mit y in $\Psi \circ s^I$.
Die Auswertung von G^I findet statt bei

$$s^I(y^I_\Omega) = -\frac{1}{a} \quad \Leftrightarrow \quad y^I_\Omega = -\frac{1}{\alpha}\frac{\omega}{a}\frac{1}{\omega - a}. \tag{B.23}$$

Dann ergibt sich

$$r^I(y^I_\Omega) = \ln\left(-\frac{1}{\beta a}\right), \tag{B.24}$$

also muß $\beta < 0$ sein!
Es gilt nun:

$$\begin{aligned} G^I_n(y) &:= D_n \circ s^I(y) + r^I(y) \\ &= < \ln\left(\frac{1}{\beta}\left(\frac{S_n}{\omega - a} - 1\right) + yS_n\frac{\alpha}{\beta}\right) > \\ &= < \ln\left(S_n\frac{s^I(y)}{\beta} - \frac{1}{\beta}\right) > . \end{aligned} \tag{B.25}$$

Eine Entwicklung um den Nullpunkt ist nur möglich, wenn der erste Ausdruck im Logarithmus positiv ist.
Für beliebige $S_n > 0$ geht das nur im Fall $\omega - a < 0$.
Für $y_0^I = -\frac{1}{\alpha(\omega-a)}$ gilt $G_n^I(y_0^I) = \ln(-\frac{1}{\beta})$, weil dort S_n verschwindet.

II.Fall: $\omega - a > 0$

Eine zweite Lösung von (B.18) ist

$$s^{II}(y) = \frac{\gamma}{y} + \frac{1}{\omega - a}. \tag{B.26}$$

Es gilt :

$$\Phi \circ s^{II}(y) = s^{II}\left(y\frac{a}{\omega}\right). \tag{B.27}$$

Dann gilt

$$\Psi \circ s^{II}(y) = a\frac{s^{II}(y\frac{a}{\omega})}{s^{II}(y)}. \tag{B.28}$$

Definiert man

$$r^{II}(y) = \ln\left(\frac{y}{\delta}s^{II}(y)\right), \tag{B.29}$$

so verschwinden in der Differentialgleichung die Terme mit y in $\Psi \circ s^{II}$.
Die Auswertung von G^{II} findet statt bei

$$s^{II}(y_\Omega^{II}) = -\frac{1}{a} \quad \Leftrightarrow \quad \frac{1}{y_\Omega^{II}} = -\frac{1}{\gamma}\frac{\omega}{a}\frac{1}{\omega - a}. \tag{B.30}$$

Daraus ergibt sich

$$r^{II}(y_\Omega^{II}) = \ln\left(\frac{\gamma}{\delta}\left(1 - \frac{a}{\omega}\right)\right). \tag{B.31}$$

Es gilt nun:

$$\begin{aligned} G_n^{II}(y) &:= D_n \circ s^{II}(y) + r^{II}(y) \\ &= < \ln\left(S_n\frac{\gamma}{\delta} + \frac{y}{\delta}\left(\frac{S_n}{\omega - a} - 1\right)\right) > \\ &= < \ln\left(S_n s^{II}(y)\frac{y}{\delta} - \frac{y}{\delta}\right) > . \end{aligned} \tag{B.32}$$

Also muß gelten $\frac{\gamma}{\delta} > 1 \Rightarrow \frac{a}{\omega} < 1$, also $\omega - a > 0$.
Für $y_0^{II} = -\gamma(\omega - a)$ gilt $G_n^{II}(y_0^{II}) = \ln(\frac{\gamma}{\delta}(\omega - a))$, weil dort S_n verschwindet.
Nun hat man eine Differentialgleichung 1.Ordnung in G und kennt jeweils einen Funktionswert.
Die Gleichung ist jedoch keine gewöhnliche Differentialgleichung, und es zeigt sich, daß man im Fall I noch eine Zusatzinformation braucht.
Dies ist anders als bei den in [14] behandelten Fällen, in denen man die Normierungsbedingung $C_0 = 1$ fordern konnte.
Wählt man nun

$$\alpha = \gamma = \frac{1}{a - \omega}, \qquad \beta = -1, \qquad \delta = -1, \tag{B.33}$$

so ergibt sich:

$$
\begin{aligned}
s^I(y) &= \tfrac{1}{a-\omega}(y-1), & r^I(y) &= \ln(-s(y)), \\
s^{II}(y) &= \tfrac{1}{\omega-a}(1-\tfrac{1}{y}), & r^{II}(y) &= \ln\left(\tfrac{1}{\omega-a}(1-y)\right), \\
y_0^I &= 1, & y_0^{II} &= 1, \\
G^I(y_0^I) &= 0, & G^{II}(y_0^{II}) &= 0.
\end{aligned}
\tag{B.34}
$$

Als nächstes wird die Differentialgleichung für u in eine Differentialgleichung für y umgeschrieben. Die alte Differentialgleichung lautete:

$$
D(u) = cu\partial_u[D(u) - pD\circ\Phi(u) - p\ln\Psi(u)] + D\circ\Phi + \ln\Psi(u) - \Omega + qc. \tag{B.35}
$$

Mit

$$
\Phi\circ s(y) = s(ky), \qquad G(y) = D\circ s(y) + r(y) \tag{B.36}
$$

gilt in den neuen Variablen:

$$
\begin{aligned}
&[1 - c\tfrac{s}{s'}(y)\partial_y]\,[G(y) - pG(ky)] \\
&= cq\,(1 - \tfrac{s}{s'}r'(y)) + (\ln\Psi\circ s(y) + r(y) - r(ky)) - \Omega + qG(ky).
\end{aligned}
\tag{B.37}
$$

Beachte, daß die Klammer mit dem Logarithmus nicht mehr von y abhängt!

Im Fall I lautet die Differentialgleichung

$$
[1 + c(1-y)\partial_y]\left[G^I(y) - pG^I\left(y\frac{\omega}{a}\right)\right] = \ln a - \Omega + qG^I\left(y\frac{\omega}{a}\right). \tag{B.38}
$$

Eine spezielle Lösung erhält man durch den Potenzreihenansatz:

$$
G^I(y) = \sum_{k=1}^{\infty} q\frac{C_k}{k}\frac{1}{1 - p\,(\frac{\omega}{a})^k}\left(y^k - 1\right). \tag{B.39}
$$

Ordnet man nach Potenzen von y, so ergibt sich:

$$
\begin{aligned}
&\Omega = \ln a - qcC_1, \\
&C_k\left[1 - \frac{1}{kc}\left(1 - \frac{q}{(\frac{a}{\omega})^k - p}\right)\right] = C_{k+1} \qquad (k = 1, \ldots, \infty).
\end{aligned}
\tag{B.40}
$$

Der Koeffizient C_1 ist jedoch unbestimmt!
Diese Potenzreihe ist bei $y = 1$ für $c > 0$ absolut konvergent, für $c < 0$ jedoch divergent.

Konsistenzcheck:

$$
\Omega = D\left(-\frac{1}{a}\right) = G^I(y_\Omega) - r^I(y_\Omega) = G^I\left(\frac{\omega}{a}\right) + \ln a. \tag{B.41}
$$

Zu zeigen ist also $G^I\left(\frac{\omega}{a}\right) = -qcC_1$.
Es gilt:

$$G^I\left(\frac{\omega}{a}\right) = -q\sum_1 C_k \frac{1}{k}\left(1 - \frac{q}{\left(\frac{a}{\omega}\right)^k - p}\right). \tag{B.42}$$

Setzt man die Rekursionsformel ein, folgt

$$\begin{aligned} G^I\left(\frac{\omega}{a}\right) &= -qc\sum_1 (C_k - C_{k+1}) \\ &= -qcC_1. \end{aligned} \tag{B.43}$$

Im Fall II lautet die Differentialgleichung

$$[1 + cy(1-y)\partial_y]\left[G^{II}(y) - pG^{II}\left(y\frac{a}{\omega}\right)\right] = qc(1-y) + \ln\omega - \Omega + qG^{II}\left(y\frac{a}{\omega}\right). \tag{B.44}$$

Eine spezielle Lösung erhält man durch den Potenzreihenansatz:

$$G^{II}(y) = \sum_{k=1}^{\infty} q\frac{D_k}{k}\frac{1}{1 - p\left(\frac{a}{\omega}\right)^k}\left(y^k - 1\right). \tag{B.45}$$

Ordnet man nach Potenzen von y, so ergibt sich:

$$\Omega = \ln\omega + qc, \tag{B.46}$$

$$\begin{aligned} &D_k\left[1 + \frac{1}{kc}\left(1 - \frac{q}{\left(\frac{\omega}{a}\right)^k - p}\right)\right] = D_{k-1} \qquad (k = 1, \ldots, \infty), \\ &D_0 = -1. \end{aligned} \tag{B.47}$$

Diese Potenzreihe ist bei $y = 1$ für $c > 0$ absolut konvergent, für $c < 0$ jedoch divergent.

Konsistenzcheck:

$$\Omega = D\left(-\frac{1}{a}\right) = G^{II}(y_\Omega) - r^{II}(y_\Omega) = G^{II}\left(\frac{a}{\omega}\right) + \ln\omega. \tag{B.48}$$

Zu zeigen ist $G^{II}\left(\frac{a}{\omega}\right) = qc$.
Es gilt:

$$G^{II}\left(\frac{a}{\omega}\right) = -q\sum_1 D_k \frac{1}{k}\left(1 - \frac{q}{\left(\frac{\omega}{a}\right)^k - p}\right). \tag{B.49}$$

Setzt man die Rekursionsformel ein, folgt

$$\begin{aligned} G^{II}\left(\frac{a}{\omega}\right) &= qc\sum_1 (D_k - D_{k-1}) \\ &= -qcD_0 = qc. \end{aligned} \tag{B.50}$$

Im homogenen Fall $q = 0, p = 1$ wird damit das bekannte Ergebnis reproduziert:

$$\Omega(\theta) = \ln\max(a, \omega). \tag{B.51}$$

Literaturverzeichnis

[1] R.J.Baxter, *Exactly Solved Models in Statistical Mechanics*, Academic Press, London (1982)

[2] E.H.Lieb und F.Y.Wu, *Two-Dimensional Ferroelectric Models*, in: Phase Transitions and Critical Phenomena, vol.1, Hrsg. C.Domb und M.S.Green, Academic Press, London (1972)

[3] C.Fan und F.Y.Wu, *General Lattice Model of Phase Transitions*, Phys.Rev. **B2** (1970) 723

[4] C.Fan und F.Y.Wu, *Ising Model with Second-Neighbour Interaction. I.Some Exact Results and an Approximate Solution*, Phys.Rev. **179** (1969) 560-570

[5] F.Y.Wu, *Exactly Soluble Model of the Ferroelectric Phase Transition in Two Dimensions*, Phys.Rev.Lett. **18** (1967) 605

[6] F.Y.Wu, *Remarks on the Modified Potassium Dihydrogen Phosphate Model of a Ferroelectric*, Phys.Rev. **168** (1968) 539

[7] C.A.Hurst, *New Approach to the Ising Problem*, J.Math.Phys. **7** (1966) 305

[8] C.A.Hurst und H.S.Green, *New Solution of the Ising Problem for a Rectangular Lattice*, J.Chem.Phys. **33** (1960) 1059

[9] F.J.Dyson, *The Dynamics of a Disordered Linear Chain*, Phys.Rev. **92** (1953) 1331

[10] T.M.Nieuwenhuizen, *A New Approach to the Problem of Disordered Harmonic Chains*, Physica **113 A** (1982) 173

[11] T.M.Nieuwenhuizen, *Exact Electronic Spectra and Inverse Localization Lengths in One-Dimensional Random Systems*, Physica **120 A** (1983) 468

[12] C.de Calan, J.M.Luck, T.M.Nieuwenhuizen und D.Petritis, *On the Distribution of a Random Variable Occuring in 1D Disordered Systems*, J.Phys. **A 18** (1985) 501

[13] T.M.Nieuwenhuizen und J.M.Luck, *Exactly Soluble Random Field Ising Models in One Dimension*, J.Phys. **A 19** (1986) 1207

[14] T.M.Nieuwenhuizen und H.Orland, *Thermodynamics of Ising Models with Layered Randomness*, Phys.Rev. **B 40** (1989) 5094

[15] H.S.Wall, *Analytic Theory of Continued Fractions*, D. Van Nostrand Company, New York 1948

[16] *Higher Transcendental Functions, vol.1*, Hrsg. A.Erdelyi, McGraw-Hill Book Co., New York 1953

[17] B.M.McCoy und T.T.Wu, *Theory of a Two-Dimensional Ising Model with Random Impurities*, Phys.Rev. **176** (1968) 631

[18] B.M.McCoy, *Theory of a Two Dimensional Ising Model with Random Impurities. IV. Generalizations*, Phys.Rev. **B 2** (1970) 2795

[19] B.M.McCoy und T.T.Wu, *Random Impurities as the Cause of Smooth Specific Heats near the Critical Temperature*, Phys.Rev.Lett. **21** (1968) 549

[20] H.Au-Yang und B.M.McCoy, *Theory of Layered Ising Models: Thermodynamics*, Phys.Rev. **B 10** (1974) 886

[21] A.B.Harris, *Effects of Random Defects on the Critical Behaviour of Ising Models*, J.Phys. **C 7** (1974) 1671

[22] J.M.Luck, *A Classification of Critical Phenomena on Quasicristals and other Aperiodic Structures*, preprint **SPht/93/081** (1993)

[23] V.S.Dotsenko und Vl.S.Dotsenko, *Critical Behaviour of the Phase Transition in the 2D Ising Model with Impurities*, Adv.Phys. **32** (1983) 129

[24] J.M.Luck, *Critical Behaviour of the Aperiodic Quantum Ising Chain in a Transverse Magnetic Field*, J.Stat.Phys. **72** (1993) 417

[25] J.M.Luck, *Cantor Spectra and Scaling of Gap Widths in Deterministic Aperiodic Systems*, Phys.Rev. **B 39** (1989) 5834

[26] M.Simon, Diplomarbeit Bonn 1995