

AUSGEWÄHLTE KAPITEL
DER
QUANTENFELDTHEORIE

G.Roepstorff

Institut für Theoretische Physik

RWTH Aachen

SS 01

Inhaltsverzeichnis

1	Das Standardmodell	2
1.1	Materie	2
1.2	Die Struktur der Eichgruppe	5
1.3	Die Konstruktion des Darstellungsraumes V der Leptonen und Quarks	9
1.4	Die Standardbasis für $\wedge \mathbb{C}^5$	12
1.5	Das Higgs-Feld und die Yukawa-Kopplung	16
1.6	Unitäre CKM-Matrizen der Leptonen und Quarks	19
2	Die Brownsche Bewegung	24
2.1	Die eindimensionale Zufallsbewegung	24
2.2	Die d-dimensionale Irrfahrt	28
2.3	Imaginäre Zeit	31
2.4	Der Wiener-Prozeß (d=3)	34
2.4.1	Die Analysis zufälliger Pfade	34
2.4.2	Gaußische Prozesse	37
2.4.3	Unabhängige Zuwächse	38
3	Pfadintegrale in der Quantenmechanik	40
3.1	Das bedingte Wiener-Maß	40
3.2	Approximation durch äquidistante Zeiten	43
3.3	Die Feynman-Kac-Formel	44
3.4	Zwei Anwendungen	49
3.5	Die Brownsche Röhre	49
3.6	Die Golden-Thompson-Symanzik-Schranke	51
3.7	Zur statistischen Mechanik klassischer Spinsysteme	56
3.8	Von den Spinsystemen zur Mehlerschen Formel	59
4	Euklidische Feldtheorie:	63
4.1	Das euklidische Feld kann kein Operatorfeld sein	63
4.2	Die euklidische Zweipunktfunktion	65
4.3	Das freie euklidische Skalarfeld	69
4.3.1	Die n-Punktfunktionen	69
4.4	Die stochastische Interpretation	71
4.5	Gaußische Funktionalintegrale	74
5	Euklidische Feldtheorie:	79
5.1	Die Gitterversion des Skalarfeldes	79
5.2	Der euklidische Propagator auf dem Gitter	81

5.2.1	Darstellung durch Fourier-Zerlegung	81
5.2.2	Darstellung durch Zufallswege auf dem Gitter	87
5.3	Das Variationsprinzip	89
5.4	Modelle mit diskretem Phasenraum	89
5.5	Modelle mit kontinuierlichem Phasenraum	91
5.6	Die effektive Wirkung	95
5.7	Das effektive Potential	101
5.8	Die Ginsburg-Landau-Gleichungen	104
6	Quantisierung der Eichtheorien	109
6.1	Die euklidische Version der Maxwell-Theorie	109
6.1.1	Die klassische Situation ($\hbar = 0$)	109
6.1.2	Die allgemeine Situation ($\hbar > 0$)	114
6.2	Nicht-abelsche Eichtheorien	116
6.2.1	Einige Vorbetrachtungen	116
6.3	Die Faddeev-Popov-Theorie	118
6.3.1	Erste Stufe: Eine Zerlegung der Zahl 1	118
6.3.2	Zweite Stufe: Division durch das Gruppenvolumen	121
6.3.3	Dritte Stufe: Tanz der Geister	123
6.4	Eichtheorien auf dem Gitter	125
6.5	Die Kunst der Schleifen (Wilson Loops)	129
6.5.1	Statische Approximation der Yukawa-Kopplung	129
6.5.2	Schleifenintegrale in der euklidischen QED	131
6.5.3	Flächengesetz oder Umfangsgesetz?	133
7	Fermionen	135
7.1	Das Dirac-Feld mit acht Komponenten	135
7.2	Das euklidische Dirac-Feld	137
7.3	Grassmann-Algebren	141
7.4	Formale Ableitungen	145
7.5	Formale Integration	147
7.5.1	Integrale über $A(E)$	147
7.5.2	Integrale über $A(E \oplus F)$	149
7.5.3	Integrale vom Exponentialtyp	150
7.5.4	Fourier-Laplace-Transformation	152
7.6	Funktionalintegrale der QED	154
7.7	Gittereichtheorien mit Materiefeldern	157
7.7.1	Das $SU(n)$ -Higgs-Modell	157
7.7.2	$SU(n)$ -Eichtheorie mit Fermionen	158

8	Funktionale Integration und Lokale Anomalien	160
8.1	Einführung	160
8.2	Vektorartige Modelle	161
8.3	Chirale Modelle	166
8.4	Anomalie-freie Eichtheorien	167
8.4.1	Das Wunder	167
8.4.2	Die äußere Algebra und ihre \mathbb{Z}_2 -Graduierung	168
8.4.3	Techniken zur Berechnung	170
8.4.4	Diskussion des Resultates	172

1 Das Standardmodell

Das Standardmodell ist eine renormierbare Feldtheorie, die die elektroschwache Wechselwirkung (das Salam-Weinberg-Modell) und die starke Wechselwirkung (die QCD) in sich vereinigt. Bei dem gegenwärtigen Stand der experimentellen Resultate gibt diese Theorie eine korrekte und vollständige Beschreibung der Elementarteilchenphysik. Sie erreicht die beeindruckende Übereinstimmung mit der Beobachtung durch ihr hohes Maß an Flexibilität, d.h. durch Anpassung ihrer freien Parameter an die Daten.

1.1 Materie

Im Standardmodell wird die sogenannte Materie (engl. matter) von den Eichbosonen und dem Higgs-Boson unterschieden. Es handelt sich hierbei ausschließlich um Fermionen, die zu Beginn ohne Masse eingeführt werden und ihre Masse am Ende durch den Higgs-Mechanismus erhalten. Die Fermionen (besser: die ihnen zugeordneten Felder) werden in drei Generationen getrennt, wobei jede Generation zwei Leptonen und zwei Quarks enthält:

	1. Gen.	2. Gen.	3. Gen.	el. Ladung
Leptonen	ν_e	ν_μ	ν_τ	0
	e	μ	τ	-1
Quarks	u	c	t	2/3
	d	s	b	-1/3

Eine ähnliche Tabelle existiert für die Antiteilchen (besser: die ladungskonjugierten Felder), wobei die jeweilige elektrische Ladung ihr Vorzeichen ändert.

Wir nennen *Leptonen* solche fundamentalen Fermionen, die farbneutral sind, d.h. die sich gemäß der trivialen Darstellung der Farb-SU(3) transformieren, während die Quarks Farb-Triplets bilden. Wir nennen *Neutrinos* solche Leptonen, die keine elektrische Ladung tragen. Aus heutiger Sicht gibt es Gründe anzunehmen, daß Neutrinos massive Teilchen sind, wenn auch die Masse des Elektron-Neutrinos ν_e sicher sehr klein ist (< 3 eV). In dem alten *minimalen* Standard-Modell, das endgültig der Vergangenheit angehört, waren alle Neutrinos masselos und linkshändig (die Antineutrinos folglich rechtshändig). Heute nehmen wir an, daß rechtshändige Neutrino-Felder in die Lagrange-Dichte des Standard-Modells eingehen, jedoch so, daß sie nicht an die Eichfelder koppeln.

Der Begriff *Generation* erklärt sich dadurch, daß die Eichtransformationen des Standardmodells immer nur die Felder einer Generation unter sich transformieren, wobei die Wirkung in jeder Generation die gleiche ist. Gäbe

es nur die Eichkopplungen, so würde jeder fermionische Zustand dreifach entartet auftreten. Es sind die Yukawa-Kopplungen (Ankopplung an das Higgs-Feld), die diese Entartung aufheben und zu verschiedenen Massen in den drei Generationen, aber auch zu verschiedenen Massen innerhalb jeder Generation führen.

Ziel der Beschreibung ist es, ein gemeinsames Dirac-Feld $\psi(x)$ für alle fundamentalen Fermionen einzuführen, das entsprechend viele Komponenten hat. Mathematisch formuliert heißt dies, daß ψ Werte in einem Raum annimmt, der komplex-linear ist und eine Tensorprodukt-Struktur besitzt:

$$\mathbb{C}^3 \otimes V \otimes S, \quad \text{Dim } S = 4.$$

Hier bezeichnet S den üblichen Spinor-Raum, in dem die γ -Matrizen und damit auch die Lorentz-Transformationen wirken; V ist ein geeigneter Darstellungsraum der Eichgruppe G mit Skalarprodukt¹. Der Raum \mathbb{C}^3 schließlich beschreibt die drei Generationen und damit die Entartung vor Einführung des Higgs-Feldes.

Bei Beschränkung auf eine einzige Generation reicht der Raum $V \otimes S$ zur Beschreibung aus. Nach Wahl einer geeigneten Basis (e_I) in V können wir $\psi(x)$ in elementare Dirac-Felder $\psi_I(x)$ zerlegen,

$$\psi(x) = \sum_I e_I \otimes \psi_I(x), \quad \psi_I(x) \in S,$$

wobei jedes elementare Feld eine definierte Helizität (R oder L) besitzt, die durch die Eigenwerte ± 1 von γ_5 definiert wird. Da die $\psi_I(x)$ durch die letzte Forderung auf zwei Komponenten reduziert sind, handelt es sich offenbar um Weyl-Felder. Es gibt dann eine Zuordnung von Indizes I zu den Leptonen und Quarks der obigen Tabelle, wobei jedes Leptonfeld zweifach (R/L) und jedes Quarkfeld sechsfach (R/L, 3 Farben) auftritt. Dies gibt dem Raum V die Mindestdimension 16. Beziehen wir die Antiteilchen mit in die Beschreibung ein, so erhöht sich die Dimension auf

$$\text{Dim } V = 2^5 = 32.$$

Potenzen von 2 spielen offenbar eine besondere Rolle. Wir wollen dies später bei der Konstruktion von V berücksichtigen.

Mathematisch gesehen ist der Diracsche Spinorraum S in natürlicher Weise \mathbb{Z}_2 -graduiert,

$$S = S^+ \oplus S^-, \quad \text{Dim } S^\pm = 2$$

¹Man sagt auch, V habe eine *hermitesche Struktur*. Sie ist erforderlich, weil nur so die Forderung, die Darstellung von G solle unitär sein, einen Sinn hat.

und ψ_I nimmt Werte entweder in S^+ oder in S^- an. Offenbar legt der Index I fest, welche Helizität das Feld $\psi_I(x)$ besitzt. Diese Tatsache gibt dem Raum V eine \mathbb{Z}_2 -Graduierung, d.h. es gilt

$$V = V^+ \oplus V^-$$

$$V^\pm = \text{lineare Hülle von } \{e_I \mid \gamma_5 \psi_I = \pm \psi_I\}.$$

Die Konstruktion koppelt die Graduierungen von V und S in einer Weise, daß von dem Tensorprodukt $V \otimes S$ nur der *positive* Teilraum

$$(V \otimes S)^+ = (V^+ \otimes S^+) \oplus (V^- \otimes S^-)$$

für den Wertebereich von ψ infrage kommt. Da es sich bei der Eichgruppe G – wie auch immer sie aussieht – um innere Symmetrien handelt, transformiert sie die Felder gegebener Helizität unter sich. Dies bedeutet, daß die Darstellung von G auf V die Graduierung respektiert. Anders formuliert: Die Darstellung ist *reduzibel*; V^+ und V^- sind invariante Unterräume. Wir haben somit erkannt, daß eine *irreduzible* Darstellung als Grundlage des Standardmodells nicht infrage kommt.

Es ist eine weithin akzeptierte Annahme, daß der fermionische Anteil der Lagrange-Dichte bilinear in dem Dirac-Feld ψ ist und Massenterme hierbei nicht auftreten:

$$\mathcal{L}_F = \text{Re}(\bar{\psi} i \not{D} \psi). \quad (1)$$

Mit \not{D} bezeichnen wir einen geeignet gewählten verallgemeinerten Dirac-Operator. Es gilt in jedem Fall

$$\begin{aligned} \not{D} &= \not{D} + L = D_\mu \gamma^\mu + L \\ &= (\partial_\mu + \text{Eichfelder}) \gamma^\mu + \text{Higgs-Felder} \end{aligned}$$

und enthält somit die Eich- wie auch die Yukawa-Kopplungen. Gewöhnliche Dirac-Operatoren haben $L = 0$, schließen also Yukawa-Kopplungen nicht ein. Wir erinnern daran, daß der Operator D eine durch die Eichgruppe gegebenen Zusammenhang (auch kovariante Ableitung genannt) beschreibt. Wir werden später darauf eingehen, daß $\not{D} = D + L$ den Begriff des Zusammenhanges erweitert; \not{D} wird *Superzusammenhang* genannt, und \not{D} ist der ihm zugeordnete Dirac-Operator.

Vereinfachend schreibt man häufig $\bar{\psi} i \not{D} \psi$ für die Lagrange-Dichte, weil die Differenz zum oben stehenden Ausdruck eine Divergenz ist und nicht zum Wirkungsintegral beitragen kann:

$$i \text{Im}(\bar{\psi} i \not{D} \psi) = i \partial_\mu (\bar{\psi} \gamma^\mu \psi).$$

1.2 Die Struktur der Eichgruppe

Als Eichtheorie liegt dem Standardmodell die Lie-Algebra

$$\text{Lie } G = \mathfrak{su}(3) \oplus \mathfrak{su}(2) \oplus \mathfrak{u}(1) \quad (2)$$

zugrunde mit den folgenden Bedeutungen:

- $\mathfrak{su}(3)$ beschreibt die Farbfreiheitsgrade.
- $\mathfrak{su}(2)$ beschreibt den schwachen Isospin.
- $\mathfrak{u}(1)$ beschreibt die schwache Hyperladung.

Die $\mathfrak{u}(1)_Q$ der QED ist in der Lie-Algebra

$$\mathfrak{u}(2) = \mathfrak{su}(2) \oplus \mathfrak{u}(1)$$

verborgen, wie bereits im Zusammenhang mit dem Salam-Weinberg-Modell diskutiert.

Obleich durch (2) die Eichgruppe G lokal (in der Nähe der Einheit) festgelegt ist, bleibt ihre globale Struktur unbestimmt. Es gibt immer mehrere Lie-Gruppen mit der gleichen Lie-Algebra. Es ist oft daran gedacht worden, die Gruppe $SU(5)$ als Eichgruppe einer Theorie der großen Vereinigung (grand unified theory: GUT) einzuführen, mit wenig Erfolg allerdings, weil darin das Proton instabil würde. Eine schwächere konfliktfreie Annahme ist die folgende:

- Die Eichgruppe G des Standardmodells ist eine Untergruppe von $SU(5)$. Sie besteht aus allen 5×5 -Matrizen der Form

$$\begin{pmatrix} u & 0 \\ 0 & v \end{pmatrix}, \quad u \in U(3), \quad v \in U(2), \quad \text{Det } u \cdot \text{Det } v = 1.$$

Der Einfachheit halber werden wir die Elemente der Gruppe G als Paare (u, v) einführen. Es ist leicht einzusehen, daß die Lie-Algebra von G die gewünschte Struktur (2) besitzt.

Die Farb- $SU(3)$ identifizieren wir als Untergruppe von G vermöge der Einbettung

$$j: SU(3) \rightarrow G, \quad u \mapsto (u, \mathbb{1}_2).$$

Die Gruppe $U(2)$ der elektroschwachen Theorie hingegen ist keine Untergruppe. Ihre Verknüpfung mit G erreichen wir durch den Homomorphismus

$$s: G \rightarrow U(2), \quad (u, v) \mapsto v.$$

Wir erhalten so eine exakte Sequenz von Gruppen:

$$1 \longrightarrow SU(3) \xrightarrow{j} G \xrightarrow{s} U(2) \longrightarrow 1. \quad (3)$$

In Worten: Die $SU(3)$ ist ein Normalteiler² von G und die $U(2)$ der Quotient $G/SU(3)$.

Eine Theorie, die von Leptonen allein ausgeht, hat die $U(2)$ als Eichgruppe, und die Hyperladung Y ist mit dem Zentrum

$$U(1) = \{e^{i\alpha} \mathbb{1}_2 \mid 0 \leq \alpha < 2\pi\}$$

dieser Gruppe verknüpft, so daß Y ganzzahlig für alle leptonische Zustände ist. Das Bild ändert sich, sobald Quarks hinzugefügt werden. Die Gruppe $U(1)$, die die Hyperladung beschreibt, ist zwar immer noch das Zentrum von $U(2)$, jedoch nicht mehr als Untergruppe von G , also nicht als Symmetriegruppe auffassbar. An ihre Stelle tritt das Zentrum von G , eine Überlagerungsgruppe $\tilde{U}(1)$ von $U(1)$ und Symmetriegruppe im Standardmodell. Diese Tatsache ist verantwortlich für das Auftreten von drittelzahligen Werten der Hyperladung Y . Um dies zu demonstrieren, betrachten wir die exakte Sequenz

$$1 \longrightarrow \mathbb{Z}_3 \xrightarrow{j} \tilde{U}(1) \xrightarrow{s} U(1) \longrightarrow 1, \quad (4)$$

die aus (3) durch Beschränkung auf das Zentrum der jeweiligen Gruppe folgt. Hierin gilt:

- Das Zentrum $\tilde{U}(1)$ von G wird aus Elementen der Form

$$\text{diag}(e^{i\beta}, e^{i\beta}, e^{i\beta}, e^{i\alpha}, e^{i\alpha}) \in SU(5)$$

gebildet. Sie genügen der Bedingung $(e^{i\beta})^3(e^{i\alpha})^2 = 1$. Man kann diese Gruppe auch als eine abgeschlossene einparametrische Untergruppe des 2-Torus auffassen:

$$\tilde{U}(1) = \{(e^{i\beta}, e^{i\alpha}) \mid 3\beta + 2\alpha = 0 \pmod{2\pi}\}.$$

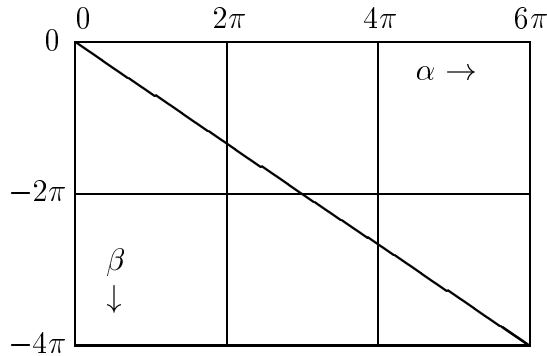
Sie ist damit einer $U(1)$ isomorph.

- Die zyklische Gruppe \mathbb{Z}_3 der Ordnung 3 ist durch die komplexen Lösungen der Gleichung $z^3 = 1$ definiert. Man kann sie mit dem Zentrum der Gruppe $SU(3)$, wie hier geschehen, identifizieren. Durch j wird z auf $(z, 1) \in \tilde{U}(1)$ abgebildet.

²weil Kern eines Homomorphismus, auch *invariante Untergruppe* genannt

- Durch s wird $(e^{i\beta}, e^{i\alpha})$ auf $e^{i\alpha} \in U(1)$ abgebildet, wobei wir $U(1)$ mit der Hyperladung verknüpfen.

Die einparametrische Gruppe $\tilde{U}(1)$ beschreibt geometrisch gesehen eine geschlossene Kurve auf dem 2-Torus. Wickeln wir den Torus, beschrieben durch die Winkel α und β auf die Ebene ab, so erscheint diese Kurve als eine Gerade mit der Steigung $-2/3$:



Anfang und Ende des hier abgebildeten Geradenstücks sind zu identifizieren. Der Winkel α durchläuft somit das Intervall $[0, 6\pi]$, bevor sich die Kurve schließt. Dies führt uns auf andere Weise vor Augen, daß es sich bei $\tilde{U}(1)$ um eine dreifache Überlagerung der $U(1)$ -Gruppe mit den Elementen $e^{i\alpha}$ handelt. In unitären irreduziblen Darstellungen der Eichgruppe G nimmt die Hyperladung Y einen festen Wert an, nur eingeschränkt durch die Bedingung

$$e^{i6\pi Y} = 1 \quad \text{oder} \quad 3Y \in \mathbb{Z},$$

wie aus dem Verhalten des Winkels α folgt. Sobald Y keinen ganzzahligen Wert hat, haben wir es streng genommen nicht mit einer Darstellung der Gruppe $U(1) = \{e^{i\alpha}\}$, sondern mit einer Darstellung der Überlagerungsgruppe $\tilde{U}(1)$ zu tun.

Lokal, d.h. in der Nähe der Einheit, können die Gruppen $U(1)$ und $\tilde{U}(1)$ identifiziert werden; denn die Überlagerungsabbildung s ist dort invertierbar:

$$s^{-1}(e^{i\alpha}) = \begin{pmatrix} e^{-i2\alpha/3} \mathbb{1}_3 & 0 \\ 0 & e^{i\alpha} \mathbb{1}_2 \end{pmatrix} \in SU(5). \quad (5)$$

Auf dem Darstellungsraum \mathbb{C}^5 der Eichgruppe G ist die Hyperladung durch die folgende spurfreie Diagonalmatrix repräsentiert³:

$$Y = i \frac{d}{d\alpha} s^{-1}(e^{i\alpha}) \Big|_{\alpha=0} = \text{diag}\left(\frac{2}{3}, \frac{2}{3}, \frac{2}{3}, -1, -1\right) \in \mathfrak{su}(5).$$

³Das Vorzeichen ist durch Konvention festgelegt.

Im leptonischen Sektor des Standardmodells mit $U(2)$ als Eichgruppe bleibt nach spontaner Symmetriebrechung nur die Untergruppe

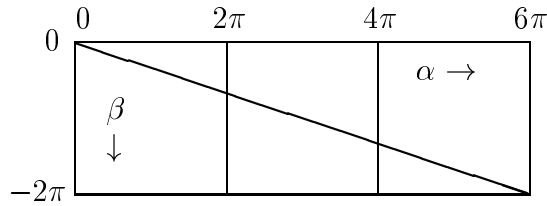
$$U(1)_Q = \left\{ \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & e^{i\alpha} \end{pmatrix} \right\} \in U(2)$$

als *residuale* Eichgruppe erhalten, die wir mit der elektrischen Ladung Q verknüpfen. Da die $U(1)_Q$ für den leptonischen Sektor eine Symmetriegruppe darstellt, sind dort alle Ladungen ganzzahlig.

Sobald wir die Quarks in die Beschreibung einbeziehen, ist nicht die $U(1)_Q$ sondern ihre dreifache Überlagerung

$$\tilde{U}(1)_Q = \left\{ \text{diag}(e^{i\beta}, e^{i\beta}, e^{i\beta}, 1, e^{i\alpha}) \mid 3\beta + \alpha = 0 \pmod{2\pi} \right\} \in SU(5)$$

die eigentliche Symmetriegruppe. Sie beschreibt ebenfalls eine geschlossene Kurve auf dem 2-Torus:



Die Folge ist, daß in unitären irreduziblen Darstellungen der Eichgruppe G die elektrische Ladung Q Werte annimmt, die der Bedingung

$$e^{i6\pi Q} = 1 \quad \text{oder} \quad 3Q \in \mathbb{Z}$$

unterliegen. Die Überlagerungsabbildung

$$\tilde{U}(1)_Q \xrightarrow{s} U(1)_Q$$

bildet $\text{diag}(e^{i\beta}, e^{i\beta}, e^{i\beta}, 1, e^{i\alpha})$ auf $\text{diag}(1, e^{i\alpha})$ ab und kann lokal invertiert werden, indem man $\beta = -\alpha/3$ setzt. Auf dem Darstellungsraum \mathbb{C}^5 der Eichgruppe G ist die elektrische Ladung durch die folgende spurfreie Diagonalmatrix repräsentiert⁴:

$$Q = i \frac{d}{d\alpha} s^{-1}(\text{diag}(1, e^{i\alpha})) \Big|_{\alpha=0} = \text{diag}\left(\frac{1}{3}, \frac{1}{3}, \frac{1}{3}, 0, -1\right) \in \mathfrak{su}(5).$$

⁴Das Vorzeichen ist durch wiederum durch Konvention festgelegt. Die Ladung Q wird grundsätzlich in Einheiten der elektrischen Elementarladung gemessen.

Vergleichen wir Q mit Y , so sehen wir, daß $Q + Y \in \mathbb{Z}$ gilt. Diese Eigenschaft ist dann auch in allen unitären irreduziblen Darstellungen der Eichgruppe G erfüllt, d.h. sie gilt auch für die Quarks und ihre Bindungszustände.

Eine weitere additive Quantenzahl ist I_3 , die dritte Komponente des schwachen Isospins. Sie ist auf dem Raum \mathbb{C}^5 durch die Diagonalmatrix

$$I_3 = \text{diag}(0, 0, 0, \frac{1}{2}, -\frac{1}{2}) \in \mathfrak{su}(5)$$

vertreten, aus der man die Eigenwerte unmittelbar abliest. Nun sind Y , Q und I_3 nicht unabhängig voneinander. Es gilt

$$Q = I_3 + \frac{1}{2}Y,$$

wie man unmittelbar einsieht. Diese Beziehung⁵ überträgt sich auf alle Produktdarstellungen, von denen wir jetzt einige konstruieren wollen.

1.3 Die Konstruktion des Darstellungsraumes V der Leptonen und Quarks

Da die Eichgruppe G Untergruppe der $SU(5)$ ist, agiert sie in natürlicher Weise auf dem Raum

$$\mathbb{C}^5 = \mathbb{C}^3 \oplus \mathbb{C}^2$$

mit Unterräumen \mathbb{C}^3 und \mathbb{C}^2 für die definierenden Darstellungen der Farbgruppe $SU(3)$ und der $SU(2)$ -Gruppe des schwachen Isospins. Dennoch ist \mathbb{C}^5 kein geeigneter Raum, um darin die fundamentalen Fermionen einer Generation unterzubringen. Zudem trägt dieser Raum keine natürliche \mathbb{Z}_2 -Graduierung. Eine geeignetere Wahl ist der lineare Raum, der der äußeren Algebra zugrundeliegt:

$$V = \bigwedge \mathbb{C}^5, \quad \text{Dim } V = 2^5.$$

Die äußere Algebra über einem linearen Raum (hier \mathbb{C}^5) ist ein wichtiges Konzept der multilinearen Algebra⁶. In der Physik begegnet uns dieses Konzept in Form des Fockraumes mit Fermi-Statistik. Im vorliegenden Fall beschreibe \mathbb{C}^5 , der Hilbertraum der Einteilchenzustände, gerade mal fünf Freiheitsgrade.

Man kann die äußere Algebra als eine direkte Summe linearer Räume auffassen,

$$\bigwedge \mathbb{C}^5 = \bigwedge^0 \mathbb{C}^5 \oplus \bigwedge^1 \mathbb{C}^5 \oplus \cdots \oplus \bigwedge^5 \mathbb{C}^5,$$

wobei jeder Summand ein k -faches äußeres Produkt

$$\bigwedge^k \mathbb{C}^5 = \mathbb{C}^5 \wedge \mathbb{C}^5 \wedge \cdots \wedge \mathbb{C}^5 \quad (k \text{ Faktoren, } k = 0, 1, \dots, 5)$$

⁵Mitunter wird diese Relation die Gell-Mann-Nishijima-Formel genannt.

⁶Siehe W. Greub, *Multilinear Algebra*, 2nd Ed., Springer 1978

darstellt mit der Vereinbarung $\bigwedge^0 \mathbb{C}^5 = \mathbb{C}$. Aufgrund dieser Konstruktion gilt

$$\dim \bigwedge^k \mathbb{C}^5 = \binom{5}{k}, \quad \sum_k \dim \bigwedge^k \mathbb{C}^5 = 2^5.$$

Die äußere Algebra ist in natürlicher Weise \mathbb{Z}_2 -graduiert,

$$\bigwedge \mathbb{C}^5 = \bigwedge^+ \mathbb{C}^5 \oplus \bigwedge^- \mathbb{C}^5,$$

mit positiven und negativen Unterräumen, die durch die geraden bzw. ungeraden Potenzen gebildet werden:

$$\begin{aligned} \bigwedge^+ \mathbb{C}^5 &= \bigwedge^0 \mathbb{C}^5 \oplus \bigwedge^2 \mathbb{C}^5 \oplus \bigwedge^4 \mathbb{C}^5 \\ \bigwedge^- \mathbb{C}^5 &= \bigwedge^1 \mathbb{C}^5 \oplus \bigwedge^3 \mathbb{C}^5 \oplus \bigwedge^5 \mathbb{C}^5. \end{aligned}$$

Man bestätigt leicht, daß

$$\dim \bigwedge^+ \mathbb{C}^5 = \dim \bigwedge^- \mathbb{C}^5 = 2^4$$

gilt.

Das übliche Skalarprodukt in \mathbb{C}^5 kann zu einem Skalarprodukt in $\bigwedge \mathbb{C}^5$ erweitert werden. Diesen Vorgang kennen wir von der Konstruktion des Fockraumes her. Die unitäre Wirkung der Gruppe G auf \mathbb{C}^5 kann zu einer unitären Wirkung auf $\bigwedge \mathbb{C}^5$ erweitert werden. Die dadurch erhaltene Darstellung wird mit \bigwedge bezeichnet. Jedes $g \in G$ gibt somit Anlaß zu einem kommutativen Diagramm

$$\begin{array}{ccc} \mathbb{C}^5 & \xrightarrow{g} & \mathbb{C}^5 \\ \downarrow & & \downarrow \\ \bigwedge \mathbb{C}^5 & \xrightarrow{\bigwedge g} & \bigwedge \mathbb{C}^5 \end{array}$$

wobei die senkrechten Pfeile die kanonischen Einbettungen beschreiben (\mathbb{C}^5 wird mit $\bigwedge^1 \mathbb{C}^5$ identifiziert).

Unter der Wirkung von G wird jede Potenz $\bigwedge^k \mathbb{C}^5$ zu einem invarianten Unterraum der äußeren Algebra. Die Darstellung \bigwedge ist somit reduzibel und zerfällt in Teildarstellungen \bigwedge^k ,

$$\bigwedge = \bigwedge^0 \oplus \bigwedge^1 \oplus \cdots \oplus \bigwedge^5,$$

wobei $\bigwedge^k g = g \wedge g \wedge \cdots \wedge g$ (k Faktoren) gilt und dies eine Kurzschreibweise für die Wirkung

$$\bigwedge^k g (c_1 \wedge c_2 \wedge \cdots \wedge c_k) = gc_1 \wedge gc_2 \wedge \cdots \wedge gc_k \quad (c_1, \dots, c_k \in \mathbb{C}^5, g \in G)$$

darstellt.

Es gibt unter den Teildarstellungen \bigwedge^k genau zwei eindimensionale (hier triviale) Darstellungen: $\bigwedge^0 g = 1$ und $\bigwedge^5 g = \text{Det } g = 1$. Da die Eichgruppe G nur eine Untergruppe von $SU(5)$ ist, sind alle anderen Teildarstellungen reduzibel. Um sie in ihre irreduziblen Bestandteile zerlegen zu können, gehen wir von dem Isomorphismus

$$\bigwedge(\mathbb{C}^3 \oplus \mathbb{C}^2) \cong \bigwedge \mathbb{C}^3 \otimes \bigwedge \mathbb{C}^2$$

aus. In Worten: Die äußere Algebra (der Funktor \bigwedge) verwandelt eine direkte Summe in ein Tensorprodukt. Ausgedrückt in den Dimensionen: $2^{3+2} = 2^3 \cdot 2^2$.

Zu den irreduziblen invarianten Unterräumen von $\bigwedge^k \mathbb{C}^5$ gelangen wir durch die Zerlegung

$$\bigwedge \mathbb{C}^3 = \sum_{p=0}^3 \bigwedge^p \mathbb{C}^3, \quad \bigwedge \mathbb{C}^2 = \sum_{q=0}^2 \bigwedge^q \mathbb{C}^2,$$

d.h.

$$\bigwedge^k \mathbb{C}^5 = \sum_{p+q=k} \bigwedge^p \mathbb{C}^3 \otimes \bigwedge^q \mathbb{C}^2.$$

Wir erwarten daher, daß die Leptonen und Quarks genau den folgenden irreduziblen Darstellungen der Eichgruppe G entsprechen:

$$\bigwedge^{p,q} = \bigwedge^p \otimes \bigwedge^q, \quad \text{Dim } \bigwedge^{p,q} = \binom{p}{3} \binom{q}{2}.$$

Die Darstellung $\bigwedge^{p,q}$ ordnet jedem Element (u, v) der Eichgruppe G den Operator $\bigwedge^p u \otimes \bigwedge^q v$ zu. Die \mathbb{Z}_2 -Graduierung von $\bigwedge \mathbb{C}^5$ gibt jeder Darstellung $\bigwedge^{p,q}$ die Parität

$$\kappa = (-1)^k = (-1)^{p+q},$$

die der Helizität (R/L) des Lepton- bzw. Quarkfeldes entspricht.

Um zu erkennen, welche Komponenten von $\psi(x)$ Leptonen bzw. Quarks beschreiben, müssen wir die Hyperladung Y jeder irreduziblen Darstellung $\bigwedge^{p,q}$ bestimmen. Dies erfordert eine Anwendung der Gleichung (5):

$$\begin{aligned} e^{-i\alpha Y} &= \bigwedge^{p,q}(s^{-1}(e^{i\alpha})) \\ &= \bigwedge^p e^{-i2\alpha/3} \otimes \bigwedge^q e^{i\alpha} = \exp(-i2p\alpha/3 + iq\alpha). \end{aligned}$$

Wir erhalten so die fundamentale Beziehung

$$Y = \frac{2}{3}p - q \tag{6}$$

mit deren Hilfe wir leicht entscheiden können, um welchen Feldtyp es sich handelt:

$$\begin{aligned} \text{Lepton-Felder} &: p = 0 \text{ oder } 3 \text{ (} Y \text{ ist ganzzahlig)} \\ \text{Quark-Felder} &: p = 1 \text{ oder } 2 \text{ (} Y \text{ ist drittelzahlig)}. \end{aligned}$$

Von besonderer Bedeutung ist die folgende Beobachtung. In der von uns gewählten Darstellung Λ der Gruppe G treten nur zwei Typen von Darstellungen der Isospingruppe $SU(2)$ (Untergruppe von G) auf:

- Die triviale Darstellung ($q = 0$ oder 2 , $I = I_3 = 0$). Teilchen oder Felder dieser Art heißen *Singletts*.
- Die Fundamentaldarstellung ($q = 1$, $I = \frac{1}{2}$, $I_3 = \pm\frac{1}{2}$). Teilchen oder Felder dieser Art heißen *Dubletts*.

In allen Fällen gilt der Zusammenhang $Q = I_3 + \frac{1}{2}Y$, auf den wir schon früher hingewiesen haben.

Weyl-Spinoren, die als Komponenten von ψ auftreten, sind charakterisiert durch drei *Paritäten*, die den \mathbb{Z}_2 -Graduierungen der Räume $\Lambda\mathbb{C}^5$, $\Lambda\mathbb{C}^3$, and $\Lambda\mathbb{C}^2$ entsprechen. Ihre Interpretation ist wie folgt (beachte daß $k = p + q$):

$k = \text{gerade}$: rechtshändig	$k = \text{ungerade}$: linkshändig
$p = \text{gerade}$: Materie	$p = \text{ungerade}$: Antimaterie
$q = \text{gerade}$: Singlett	$q = \text{ungerade}$: Dublett.

Da die Ladungskonjugation auf $\Lambda\mathbb{C}^5$ durch komplexe Konjugation wirkt, führt sie die Darstellung $[p, q]$ in die Darstellung $[3 - p, 2 - q]$ über. Sie vertauscht also links und rechts, Materie und Antimaterie, und kehrt die Vorzeichen von Y , I_3 und Q um, führt aber Singletts wieder in Singletts, Dubletts wieder in Dubletts über.

Abschließend wollen wir auf einen besonderen Umstand aufmerksam machen. Zunächst führen wir die Menge aller Darstellungsmatrizen ein:

$$\Lambda G = \{\Lambda g \mid g \in G\}.$$

Mit $(\Lambda G)'$ bezeichnen wir die *Kommutante*, d.h. die Algebra aller Operatoren auf dem Darstellungsraum $\Lambda\mathbb{C}^5$, die mit jedem Element der Menge ΛG kommutieren. Das Besondere der Gruppe G besteht darin, daß es sich bei $(\Lambda G)'$ um eine *kommutative Algebra* der Dimension 12 handelt. Denn die 12 Darstellungen $\Lambda^{p,q}$ (4 Werte für p , 3 Werte für q) sind irreduzibel und paarweise inäquivalent. Aufgrund des Schurschen Lemmas nimmt jedes $A \in (\Lambda G)'$ dort konstante Werte an, die sämtlich unabhängig sind. Die Freiheiten, die wir in A haben, werden sich später als wesentlich erweisen: Sie garantieren eine ausreichende Menge von freien Parametern des Standardmodells.

1.4 Die Standardbasis für $\Lambda\mathbb{C}^5$

Der Raum \mathbb{C}^5 besitzt nicht nur ein kanonisches Skalarprodukt sondern auch eine kanonische Orthonormalbasis $(e_i)_{i=1}^5$, so daß jeder Basisvektor e_i die

Komponenten $(e_i)_j = \delta_{ij}$ ($j = 1, \dots, 5$) hat. Dies induziert eine Orthonormalbasis e_I in der äußeren Algebra $\bigwedge \mathbb{C}^5$. Sie ist gegeben durch

$$e_I = e_{i_1} \wedge \dots \wedge e_{i_k} \in \bigwedge^k \mathbb{C}^5, \quad I = \{i_1, \dots, i_k\}, \quad i_1 < \dots < i_k, \quad 0 \leq k \leq 5$$

wobei I alle Teilmengen von $\{1, 2, 3, 4, 5\}$ durchläuft, die leere Menge \emptyset eingeschlossen. Gesetzt wir haben ein I gewählt, so sind die zugehörigen charakteristischen Exponenten k, p, q leicht zu bestimmen: k ist die Anzahl aller Elemente in I , p ist die Anzahl der aus $\{1, 2, 3\}$ gewählten Elemente in I , q ist die Anzahl der aus $\{4, 5\}$ gewählten Elemente in I . Anstelle von k werden wir auch $|I|$ schreiben und das Komplement von I in $\{1, 2, 3, 4, 5\}$ mit I^c bezeichnen.

In der folgenden Tabelle sind alle 32 Basisvektoren aufgelistet zusammen mit ihren p, q -Werten. Jedoch haben wir I an Stelle von e_I angegeben:

I	$q = 0$	$q = 2$	$q = 1$	
$p = 0$	\emptyset	45	4	5
$p = 2$	23	2345	234	235
	13	1345	134	135
	12	1245	124	125
$p = 1$	1	145	14	15
	2	245	24	25
	3	345	34	35
$p = 3$	123	12345	1234	1235

(7)

Die Basisvektoren der ersten beiden Spalten haben $I_3 = 0$, jene der dritten Spalte $I_3 = \frac{1}{2}$, der vierten Spalte $I_3 = -\frac{1}{2}$. Jeder Basisvektor e_I ist zugleich ein Eigenvektor der Hyperladung Y und der elektrischen Ladung Q , deren Werte die beiden folgenden Tabellen zeigen.

Y	$q = 0$	$q = 2$	$q = 1$	
$p = 0$	0	-2	-1	-1
$p = 2$	4/3	-2/3	1/3	1/3
	4/3	-2/3	1/3	1/3
	4/3	-2/3	1/3	1/3
$p = 1$	2/3	-4/3	-1/3	-1/3
	2/3	-4/3	-1/3	-1/3
	2/3	-4/3	-1/3	-1/3
$p = 3$	2	0	1	1

Q	$q = 0$	$q = 2$	$q = 1$	
$p = 0$	0	-1	0	-1
$p = 2$	2/3	-1/3	2/3	-1/3
	2/3	-1/3	2/3	-1/3
	2/3	-1/3	2/3	-1/3
$p = 1$	1/3	-2/3	1/3	-2/3
	1/3	-2/3	1/3	-2/3
	1/3	-2/3	1/3	-2/3
$p = 3$	1	0	1	0

Nach dieser Zuweisung von Ladungen finden wir auch die Zuordnung zu den entsprechenden Weyl-Spinoren der ersten Generation:

1. Gen.	$q = 0$	$q = 2$	$q = 1$	
$p = 0$	ν_{eR}	e_R	ν_{eL}	e_L
$p = 2$	u_{1R}	d_{1R}	u_{1L}	d_{1L}
	$-u_{2R}$	$-d_{2R}$	$-u_{2L}$	$-d_{2L}$
	u_{3R}	d_{3R}	u_{3L}	d_{3L}
$p = 1$	d_{1L}^c	u_{1L}^c	d_{1R}^c	$-u_{1R}^c$
	d_{2L}^c	u_{2L}^c	d_{2R}^c	$-u_{2R}^c$
	d_{3L}^c	u_{3L}^c	d_{3R}^c	$-u_{3R}^c$
$p = 3$	e_L^c	ν_{eL}^c	e_R^c	$-\nu_{eR}^c$

(8)

Entsprechende Zuordnungen existieren für die zweite und dritte Generation:

2. Gen.	$q = 0$	$q = 2$	$q = 1$		3. Gen.	$q = 0$	$q = 2$	$q = 1$	
$p = 0$	$\nu_{\mu R}$	μ_R	$\nu_{\mu L}$	μ_L	$p = 0$	$\nu_{\tau R}$	τ_R	$\nu_{\tau L}$	τ_L
$p = 2$	c_{1R}	s_{1R}	c_{1L}	s_{1L}	$p = 2$	t_{1R}	b_{1R}	t_{1L}	b_{1L}
	$-c_{2R}$	$-s_{2R}$	$-c_{2L}$	$-s_{2L}$		$-t_{2R}$	$-b_{2R}$	$-t_{2L}$	$-b_{2L}$
	c_{3R}	s_{3R}	c_{3L}	s_{3L}		t_{3R}	b_{3R}	t_{3L}	b_{3L}
$p = 1$	s_{1L}^c	c_{1L}^c	s_{1R}^c	$-c_{1R}^c$	$p = 1$	b_{1L}^c	t_{1L}^c	b_{1R}^c	$-t_{1R}^c$
	s_{2L}^c	c_{2L}^c	s_{2R}^c	$-c_{2R}^c$		b_{2L}^c	t_{2L}^c	b_{2R}^c	$-t_{2R}^c$
	s_{3L}^c	c_{3L}^c	s_{3R}^c	$-c_{3R}^c$		b_{3L}^c	t_{3L}^c	b_{3R}^c	$-t_{3R}^c$
$p = 3$	μ_L^c	$\nu_{\mu L}^c$	μ_R^c	$-\nu_{\mu R}^c$	$p = 3$	τ_L^c	$\nu_{\tau L}^c$	τ_R^c	$-\nu_{\tau R}^c$

Hier stehen die Symbole mit ihren Vorzeichen für die Komponenten ψ_I des Dirac-Feldes ψ , wobei I aus der Tabelle (7) abzulesen ist. Die ersten vier Zeilen der Tabelle (8) sind z.B. so zu interpretieren:

$$\begin{array}{llll}
\psi_0 = \nu_{eR} & \psi_{45} = e_R & \psi_4 = \nu_{eL} & \psi_5 = e_L \\
\psi_{23} = u_{1R} & \psi_{2345} = d_{1R} & \psi_{234} = u_{1L} & \psi_{235} = d_{1L} \\
\psi_{13} = -u_{2R} & \psi_{1345} = -d_{2R} & \psi_{134} = -u_{2L} & \psi_{135} = -d_{2L} \\
\psi_{12} = u_{3R} & \psi_{1245} = d_{3R} & \psi_{124} = u_{3L} & \psi_{125} = d_{3L}
\end{array}$$

Jede Tabelle ist symmetrisch aufgebaut. Die obere Hälfte beschreibt Materie, die untere Hälfte Antimaterie. Quarkfelder haben einen Farbindex i , z.B.

$$u_{iR}, u_{iL}, d_{iR}, d_{iL} \quad (i = 1, 2, 3).$$

Zugleich erkennen wir eine leichte Änderung gegenüber der traditionellen Auffassung: Die Darstellungen 3 (mit $p = 1$) und $\bar{3}$ (mit $p = 2$), beide Fundamentaldarstellungen der Farb- $SU(3)$, haben ihre Rollen vertauscht. Dies hat jedoch keinen physikalischen Effekt.

Zu jedem Weyl-Spinor ψ_I existiert der durch Ladungskonjugation entstehende Weyl-Spinor ψ_I^c , der ebenfalls in der Tabelle und damit als Komponente von ψ auftritt. Da die Ladungskonjugation die Chiralität ändert, ist besondere Sorgfalt bei der Bezeichnung geboten. Dies wollen wir am Beispiel des d -Quarks erläutern:

$$d_L^c := (d^c)_L = (d_R)^c, \quad d_R^c := (d^c)_R = (d_L)^c.$$

Einige Felder treten in den Tabellen mit einem negativen Vorzeichen auf. Der Grund hierfür ist rein algebraischer (nicht physikalischer) Natur. Die Vorzeichen sind so gewählt, daß die folgende Bedingung erfüllt ist:

$$\sigma_I \psi_I^c = \psi_{I^c}$$

wobei σ_I das Vorzeichen derjenigen Permutation ist, die $\{I, I^c\}$ in die normale Ordnung $\{1, 2, 3, 4, 5\}$ überführt, also etwa

$$\sigma_{13} = \text{sgn} \begin{pmatrix} 1 & 3 & 2 & 4 & 5 \\ 1 & 2 & 3 & 4 & 5 \end{pmatrix} = -1.$$

Gleichzeitig wird hierdurch einer bekannte Regel Rechnung getragen: Mit $(\nu_e, e)_L$, einem linkshändigen $SU(2)$ -Dublett, ist, nach Ausführung einer Ladungskonjugation,

$$(e^c, -\nu_e^c)_R = (e_L, -\nu_{eL})^c$$

ein rechtshändiges $SU(2)$ -Dublett.

1.5 Das Higgs-Feld und die Yukawa-Kopplung

Der verallgemeinerte Dirac-Operator $\mathbb{D} = \not{D} + L$ enthält bereits das Higgs-Feld zusammen mit vielen anderen Parametern in dem Operator L , der frei von γ -Matrizen ist und deshalb wie ein Skalar auf den Spinorraum S wirkt. Seine Wirkung beschränkt sich auf den Raum $\mathbb{C}^3 \otimes \wedge \mathbb{C}^5$. Wir wollen die Einschränkungen untersuchen, denen der Operator L dort unterliegt.

Die erste Einschränkung

$$L^* = -L$$

kommt von der Forderung, daß der Differentialoperator $i\mathbb{D}$ (ebenso wie $i\not{D}$) selbstkonjugiert ist, die zweite Einschränkung

$$\mathbb{C}^3 \otimes \wedge^\pm \mathbb{C}^5 \xrightarrow{L} \mathbb{C}^3 \otimes \wedge^\mp \mathbb{C}^5 \quad (9)$$

von der Forderung, daß (verallgemeinerte) Dirac-Operatoren immer *ungerade* Operatoren sind, also die Parität der Vektoren, auf die sie wirken, umkehren. Im einfachsten Fall, wenn der Dirac-Operator auf dem Raum S wirkt und die Struktur $\gamma^\mu \partial_\mu$ hat, ist dies die folgende Eigenschaft der γ -Matrizen:

$$\gamma^\mu \gamma_5 + \gamma_5 \gamma^\mu = 0.$$

Im vorliegenden Fall ist die \mathbb{Z}_2 -Graduierung (und damit die Parität) nicht allein durch die γ_5 -Matrix gegeben, sondern von komplizierterer Struktur,

nämlich durch den Darstellungsraum der Eichgruppe mitbestimmt:

$$\begin{aligned}(\mathbb{C}^3 \otimes \wedge \mathbb{C}^5 \otimes S)^\pm &= \mathbb{C}^3 \otimes (\wedge \mathbb{C}^5 \otimes S)^\pm \\ (\wedge \mathbb{C}^5 \otimes S)^+ &= (\wedge^+ \mathbb{C}^5 \otimes S^+) \oplus (\wedge^- \mathbb{C}^5 \otimes S^-) \\ (\wedge \mathbb{C}^5 \otimes S)^- &= (\wedge^- \mathbb{C}^5 \otimes S^+) \oplus (\wedge^+ \mathbb{C}^5 \otimes S^-)\end{aligned}$$

Da L trivial auf den Raum S wirkt und so seine Parität erhält, ändert L zwangsläufig die Parität in $\wedge \mathbb{C}^5$ wie in (9) angegeben.

Der Higgs-Sektor des Standardmodells ist durch die Form des Dirac-Operators bestimmt, sobald der Operator L festgelegt ist:

$$\mathcal{L}_{\text{Higgs}} = \frac{1}{2} \bar{\psi} i L \psi .$$

Hier haben wir nur den Teil des Higgs-Sektors aufgeführt, die die Wechselwirkung mit den Fermionen beinhaltet. Der Grund für den Faktor $\frac{1}{2}$ auf der rechten Seite liegt darin, daß in unserem Formalismus $\bar{\psi} i \not{D} \psi$ den Vorfaktor $\frac{1}{2}$ bekommt, weil darin mit jedem Elementarfeld ψ_I zugleich und gleichberechtigt auch das ladungskonjugierte Feld ψ_I^c auftritt. Beide Felder geben Anlaß zu identischen Ausdrücken in dem Wirkungsintegral. Wenn wir also Übereinstimmung mit dem konventionellen Ansatz für die Lagrange-Dichte erreichen wollen, ist der Faktor $\frac{1}{2}$ unausweichlich. Dieser Faktor kann allerdings vermieden werden, wenn wir uns bei ψ auf Komponenten mit $p = 0, 2$ beschränken.

Für die weitere Diskussion ist es hilfreich, eine suggestive Bezeichnung für die vier Materiefelder mit den Ladungen $Q = 0, -1, \frac{2}{3}, -\frac{1}{3}$ (jedes Feld ein *flavor*-Triplet) einzuführen:

$$\begin{aligned}\mathbf{n} &= (\nu_e, \nu_\mu, \nu_\tau) & \mathbf{u} &= (u, c, t) \\ \mathbf{e} &= (e, \mu, \tau) & \mathbf{d} &= (d, s, b).\end{aligned}$$

Das Standardmodell benutzt einen speziellen Ansatz für den Operator L , so daß der hierdurch gegebene Beitrag zur Lagrange-Dichte die folgende Form hat:

$$\begin{aligned}\mathcal{L}_{\text{Higgs}} &= \bar{\mathbf{n}}_R A_{\mathbf{n}}^* (\mathbf{n}_L \Phi_0 - \mathbf{e}_L \Phi_+) + (\bar{\mathbf{n}}_L \Phi_0^* - \bar{\mathbf{e}}_L \Phi_+^*) A_{\mathbf{n}} \mathbf{n}_R \\ &+ \bar{\mathbf{e}}_R A_{\mathbf{e}}^* (\mathbf{e}_L \Phi_0^* + \mathbf{n}_L \Phi_+^*) + (\bar{\mathbf{e}}_L \Phi_0 + \bar{\mathbf{n}}_L \Phi_+) A_{\mathbf{e}} \mathbf{e}_R \\ &+ \bar{\mathbf{u}}_R A_{\mathbf{u}}^* (\mathbf{u}_L \Phi_0 - \mathbf{d}_L \Phi_+) + (\bar{\mathbf{u}}_L \Phi_0^* - \bar{\mathbf{d}}_L \Phi_+^*) A_{\mathbf{u}} \mathbf{u}_R \\ &+ \bar{\mathbf{d}}_R A_{\mathbf{d}}^* (\mathbf{d}_L \Phi_0^* + \mathbf{u}_L \Phi_+^*) + (\bar{\mathbf{d}}_L \Phi_0 + \bar{\mathbf{u}}_L \Phi_+) A_{\mathbf{d}} \mathbf{d}_R .\end{aligned}$$

Hierin bezeichnet (ϕ_+, ϕ_0) ein $SU(2)$ -Dublett mit $Y = 1$ aus (skalaren) Higgs-Feldern. Die Bezeichnung macht deutlich, daß ϕ_+ die Ladung $Q = 1$ trägt

und ϕ_0 neutral ist, die spontane Symmetriebrechung also ein ‘Kondensat’ $\langle \phi_0 \rangle \neq 0$ hervorruft. In den Ansatz für L gehen darüberhinaus vier komplexe 3×3 -Matrizen $A_{\mathbf{n}}$, $A_{\mathbf{e}}$, $A_{\mathbf{u}}$, $A_{\mathbf{d}}$ ein, die auf die *flavor*-Freiheitsgrade wirken, also als Operatoren auf den Raum \mathbb{C}^3 zu interpretieren sind. Es gibt bislang kein überzeugendes Argument oder Prinzip, das diese Matrizen in irgendeiner Weise einschränken könnte: Sie sind frei wählbar und bestimmen die Yukawa-Kopplungen. Jedoch sind nicht alle $4 \cdot 3^2 = 36$ komplexen Parameter physikalisch relevant, da wir die Fermi-Felder unitär transformieren können.

Die obige Konstruktion gewährleistet lokale Eichinvarianz der Lagrange-Dichte. Sie nutzt aus, daß sich mit Hilfe des Higgs-Feldes vier verschiedene $SU(2)$ -Singletts konstruieren lassen:

$$\begin{aligned} \mathbf{n}_s &= A_{\mathbf{n}} \mathbf{n}_R + \mathbf{n}_L \Phi_0 - \mathbf{e}_L \Phi_+ & (Q = 0) \\ \mathbf{e}_s &= A_{\mathbf{e}} \mathbf{e}_R + \mathbf{e}_L \Phi_0^* + \mathbf{n}_L \Phi_+^* & (Q = -1) \\ \mathbf{u}_s &= A_{\mathbf{u}} \mathbf{u}_R + \mathbf{u}_L \Phi_0 - \mathbf{d}_L \Phi_+ & (Q = \frac{2}{3}) \\ \mathbf{d}_s &= A_{\mathbf{d}} \mathbf{d}_R + \mathbf{d}_L \Phi_0^* + \mathbf{u}_L \Phi_+^* & (Q = -\frac{1}{3}) \end{aligned}$$

Wir fassen sie als transformierte Dirac-Felder auf. Die Lagrange-Dichte des Higgs-Sektors kann nach Einführung dieser Felder nun kürzer geschrieben werden, wodurch ihre Struktur besser sichtbar wird:

$$\mathcal{L}_{\text{Higgs}} = \bar{\mathbf{n}}_s \mathbf{n}_s + \bar{\mathbf{e}}_s \mathbf{e}_s + \bar{\mathbf{u}}_s \mathbf{u}_s + \bar{\mathbf{d}}_s \mathbf{d}_s .$$

Insbesondere läßt sich die Eichinvarianz der rechten Seite sehr viel leichter überprüfen. Man macht sich die Korrektheit der neuen Schreibweise leicht am Beispiel des neutralen Dirac-Feldes klar:

$$\begin{aligned} \bar{\mathbf{n}}_s \mathbf{n}_s &= \bar{\mathbf{n}}_{sR} \mathbf{n}_{sL} + \bar{\mathbf{n}}_{sL} \mathbf{n}_{sR} \\ &= \overline{A_{\mathbf{n}} \mathbf{n}_R} (\mathbf{n}_L \Phi_0 - \mathbf{e}_L \Phi_+) + \overline{(\mathbf{n}_L \Phi_0 - \mathbf{e}_L \Phi_+)} A_{\mathbf{n}} \mathbf{n}_R \\ &= \bar{\mathbf{n}}_R A_{\mathbf{n}}^* (\mathbf{n}_L \Phi_0 - \mathbf{e}_L \Phi_+) + (\bar{\mathbf{n}}_L \Phi_0^* - \bar{\mathbf{e}}_L \Phi_+^*) A_{\mathbf{n}} \mathbf{n}_R . \end{aligned}$$

Der Higgs-Kibble-Mechanismus gibt eine bewährte Beschreibung der spontanen Brechung der lokalen Eichsymmetrie. Zugleich eliminiert er drei reelle Freiheitsgrade des Higgs-Feldes und überträgt diese auf die massiven Eichfelder. Danach haben wir in allen Formeln die Ersetzung

$$\phi_+(x) = 0, \quad \phi_0(x) = (H(x) + v)/\sqrt{2}$$

vorzunehmen, wobei $H(x)$ das neutrale ‘physikalische’ Higgs-Feld und v das reelle Kondensat beschreibt. Spontane Symmetriebrechung führt zur Massenerzeugung. Hierbei treten vier komplexe Massenmatrizen der Fermionen auf:

$$M_{\mathbf{n}} = v A_{\mathbf{n}} / \sqrt{2}, \quad M_{\mathbf{e}} = v A_{\mathbf{e}} / \sqrt{2}, \quad M_{\mathbf{u}} = v A_{\mathbf{u}} / \sqrt{2}, \quad M_{\mathbf{d}} = v A_{\mathbf{d}} / \sqrt{2} .$$

Ihr Einfluß zeigt sich in dem folgenden Beitrag zur Lagrange-Dichte:

$$\begin{aligned}
\text{Massenterme} &= \bar{\mathbf{n}}_R M_{\mathbf{n}}^* \mathbf{n}_L + \bar{\mathbf{n}}_L M_{\mathbf{n}} \mathbf{n}_R \\
&+ \bar{\mathbf{e}}_R M_{\mathbf{e}}^* \mathbf{e}_L + \bar{\mathbf{e}}_L M_{\mathbf{e}} \mathbf{e}_R \\
&+ \bar{\mathbf{u}}_R M_{\mathbf{u}}^* \mathbf{u}_L + \bar{\mathbf{u}}_L M_{\mathbf{u}} \mathbf{u}_R \\
&+ \bar{\mathbf{d}}_R M_{\mathbf{d}}^* \mathbf{d}_L + \bar{\mathbf{d}}_L M_{\mathbf{d}} \mathbf{d}_R
\end{aligned}$$

Die Massen der beobachteten fundamentalen Fermionen ergeben sich aus dem Spektrum:

$$\begin{aligned}
\text{spec}(M_{\mathbf{n}}^* M_{\mathbf{n}}) &= \{m_{\nu_e}^2, m_{\nu_\mu}^2, m_{\nu_\tau}^2\} \\
\text{spec}(M_{\mathbf{e}}^* M_{\mathbf{e}}) &= \{m_e^2, m_\mu^2, m_\tau^2\} \\
\text{spec}(M_{\mathbf{u}}^* M_{\mathbf{u}}) &= \{m_u^2, m_c^2, m_t^2\} \\
\text{spec}(M_{\mathbf{d}}^* M_{\mathbf{d}}) &= \{m_d^2, m_s^2, m_b^2\}
\end{aligned}$$

Beziehungen dieser Massen untereinander oder Beschränkungen, die ihnen auzuerlegen sind, gibt es in dieser Theorie nicht. Das ist sehr unbefriedigend, insbesondere deshalb, weil die kleinste Masse m_{ν_e} und die größte Masse m_t sich um mindestens 12 Größenordnungen unterscheiden. Wo liegt der Grund für solche Unterschiede?

1.6 Unitäre CKM-Matrizen der Leptonen und Quarks

Falls die vier Massenmatrizen nicht von vornherein diagonal sind – wofür es keinen Grund gibt –, gehen die im Experiment beobachtbaren Fermionen durch eine *flavor*-Mischung – beschrieben durch eine unitäre Transformation – aus den von uns gewählten Basisfeldern hervor. Denn ein bekannter Satz der Algebra sagt, daß sich jede der komplexen Matrizen $M_{\mathbf{n}}$, $M_{\mathbf{e}}$, $M_{\mathbf{u}}$, $M_{\mathbf{d}}$ durch eine *biunitäre Transformation* diagonalisieren läßt:

$$\begin{aligned}
M_{\mathbf{n}} &= U_{\mathbf{n}L}^* M'_{\mathbf{n}} U_{\mathbf{n}R}, & M'_{\mathbf{n}} &= \text{diag}(m_{\nu_e}, m_{\nu_\mu}, m_{\nu_\tau}) \\
M_{\mathbf{e}} &= U_{\mathbf{e}L}^* M'_{\mathbf{e}} U_{\mathbf{e}R}, & M'_{\mathbf{e}} &= \text{diag}(m_e, m_\mu, m_\tau) \\
M_{\mathbf{u}} &= U_{\mathbf{u}L}^* M'_{\mathbf{u}} U_{\mathbf{u}R}, & M'_{\mathbf{u}} &= \text{diag}(m_u, m_c, m_t) \\
M_{\mathbf{d}} &= U_{\mathbf{d}L}^* M'_{\mathbf{d}} U_{\mathbf{d}R}, & M'_{\mathbf{d}} &= \text{diag}(m_d, m_s, m_b)
\end{aligned}$$

Dies legt nahe, alle fundamentalen Fermi-Felder unitär zu transformieren, so daß die neuen Felder den Masseneigenzuständen entsprechen:

$$\begin{aligned}
\mathbf{n}'_R &= U_{\mathbf{n}R} \mathbf{n}_R & \mathbf{n}'_L &= U_{\mathbf{n}L} \mathbf{n}_L \\
\mathbf{e}'_R &= U_{\mathbf{e}R} \mathbf{e}_R & \mathbf{e}'_L &= U_{\mathbf{e}L} \mathbf{e}_L \\
\mathbf{u}'_R &= U_{\mathbf{u}R} \mathbf{u}_R & \mathbf{u}'_L &= U_{\mathbf{u}L} \mathbf{u}_L \\
\mathbf{d}'_R &= U_{\mathbf{d}R} \mathbf{d}_R & \mathbf{d}'_L &= U_{\mathbf{d}L} \mathbf{d}_L
\end{aligned}$$

Hierdurch werden neue (orthonormierte) Basen im *flavor*-Raum \mathbb{C}^3 eingeführt, die den tatsächlich beobachteten Teilchen entsprechen.

Die Transformation zu neuen Feldern vereinfacht zugleich auch die Beschreibung die Yukawa-Wechselwirkung mit dem Higgs-Feld $H(x)$:

$$\begin{aligned}\mathcal{L}_{\text{Higgs}} &= \mathcal{L}_{\text{Yukawa}} + \text{Massenterme} \\ \mathcal{L}_{\text{Yukawa}} &= \sum_F G_F \bar{F} F H \\ G_F &= m_F \sqrt{2}/v\end{aligned}$$

Die Summe wird über alle fundamentalen Dirac-Felder $F = F_R + F_L$ geführt, wobei F die Symbole

$$\begin{array}{ccc}\nu_e & \nu_\mu & \nu_\tau \\ e & \mu & \tau \\ u & c & t \\ d & s & b\end{array}$$

durchläuft. *Entscheidend ist, daß die Kopplungskonstante G_F proportional der Masse m_F des Fermions ist.* Die partielle Breite für den Zerfall $H \rightarrow F\bar{F}$ ist daher proportional m_F^2 . Eine unmittelbare Kopplung des Higgs-Teilchens an die Eichbosonen existiert nicht. Der Zerfall $H \rightarrow 2\gamma$ geschieht über eine virtuelle Produktion von $F\bar{F}$ -Paaren. Die Masse des (bisher nicht nachgewiesenen) Higgs-Teilchens wird im Bereich 100-200 GeV erwartet.

Die Transformation zu den Masse-Eigenzuständen hat keinen Einfluß auf alle übrigen Terme der Lagrange-Dichte des Standardmodells bis auf eine bemerkenswerte Änderung der geladenen Ströme der schwachen Wechselwirkung, da in ihnen Felder verschiedener Ladung verknüpft werden. Die ursprüngliche Gestalt dieser Ströme ist

$$j_+^\mu = \bar{\mathbf{n}}_L \gamma^\mu \mathbf{e}_L + \bar{\mathbf{u}}_L \gamma^\mu \mathbf{d}_L \quad j_-^\mu = (j_+^\mu)^*$$

und die endgültige Gestalt aufgrund der Transformation ist

$$j_+^\mu = \bar{\mathbf{n}}'_L \gamma^\mu \mathbf{e}''_L + \bar{\mathbf{u}}'_L \gamma^\mu \mathbf{d}''_L \quad j_-^\mu = (j_+^\mu)^*$$

mit den Bezeichnungen

$$\begin{aligned}\mathbf{e}''_L &= V_{\text{CKM}}^{\mathbf{e}} \mathbf{e}'_L, & V_{\text{CKM}}^{\mathbf{e}} &= U_{\mathbf{n}L} U_{\mathbf{e}L}^* \\ \mathbf{d}''_L &= V_{\text{CKM}}^{\mathbf{d}} \mathbf{d}'_L, & V_{\text{CKM}}^{\mathbf{d}} &= U_{\mathbf{u}L} U_{\mathbf{d}L}^*.\end{aligned}$$

Zwei unitäre Matrizen mit physikalischer Relevanz treten hierbei auf. Sie werden nach ihren Entdeckern Cabbibo, Kobayashi, und Maskawa als CKM-Matrizen bezeichnet:

$$\begin{aligned}V_{\text{CKM}}^{\mathbf{e}} &= \text{CKM-Matrix der Leptonen} \\ V_{\text{CKM}}^{\mathbf{d}} &= \text{CKM-Matrix der Quarks.}\end{aligned}$$

Daß wir die Felder \mathbf{e}' und \mathbf{d}' zu neuen Feldern \mathbf{e}'' und \mathbf{d}'' transformieren, ist reine Konvention. Ebenso gut könnten wir, die konjugierten CKM-Matrizen benutzend, die Felder \mathbf{n}' und \mathbf{u}' zu neuen Feldern \mathbf{n}'' und \mathbf{u}'' transformieren und darin die geladenen Ströme ausdrücken.

Es besteht der Wunsch, die CKM-Matrizen zu parametrisieren und die Parameter aus dem Experiment zu bestimmen. Eine unitäre 3×3 -Matrix enthält 9 reelle Parameter. Fünf davon sind Phasen, die sich durch Phasentransformationen aller Felder eliminieren lassen⁷. Es bleiben vier physikalisch relevante Parameter (Winkel):

$$\theta_1, \theta_2, \theta_3, \delta.$$

Die ersten drei sind den Euler-Winkeln einer Rotation $R \in SO(3)$ vergleichbar, der Winkel δ beschreibt die Abweichung von der reellen Gestalt der CKM-Matrix, die wir als ein Produkt von vier unitären Matrizen schreiben:

$$V_{\text{CKM}} = V_2 V_\delta V_1 V_3$$

mit

$$V_1 = \begin{pmatrix} \cos \theta_1 & \sin \theta_1 & 0 \\ -\sin \theta_1 & \cos \theta_1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \quad V_2 = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & \cos \theta_2 & -\sin \theta_2 \\ 0 & \sin \theta_2 & \cos \theta_2 \end{pmatrix}$$

$$V_3 = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & \cos \theta_3 & \sin \theta_3 \\ 0 & -\sin \theta_3 & \cos \theta_3 \end{pmatrix} \quad V_\delta = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & -e^{i\delta} \end{pmatrix}$$

Da die Antiteilchen mit der konjugiert komplexen CKM-Matrix verknüpft sind, wechselt unter der CP-Operation der Winkel δ sein Vorzeichen. Eine Abweichung von

$$\delta = 0 \pmod{\pi}$$

ist verantwortlich für die CP-Verletzung in der schwachen Wechselwirkung. Eine theoretische Vorhersage für die Größe von δ steht noch aus.

Die CKM-Matrix der Quarks schreibt man auch in der Form

$$V_{\text{CKM}}^{\mathbf{d}} = \begin{pmatrix} V_{ud} & V_{us} & V_{ub} \\ V_{cd} & V_{cs} & V_{cb} \\ V_{td} & V_{ts} & V_{tb} \end{pmatrix}$$

⁷Allgemein, wenn n Generationen existieren, ist die CKM-Matrix V ein Element der Gruppe $U(n)$. Dieses ist nicht eindeutig, weil V und V' als physikalisch äquivalent gelten, wenn es Diagonalmatrizen $D, D' \in U(n)$ gibt mit $DV = V'D'$. Die Äquivalenzrelation eliminiert $2n - 1$ von insgesamt n^2 reellen Parametern. Somit hat die CKM-Matrix nur $(n-1)^2$ relevante Parameter (Winkel). Von diesen sind $n(n-1)/2$ verallgemeinerte Euler-Winkel, d.h. Parameter der Gruppe $SO(n)$. Es bleiben $(n-1)(n-2)/2$ Winkel, die für das Verhalten $\bar{V} \neq V$, also für die CP-Verletzung ausschlaggebend sind.

wodurch sofort ersichtlich ist, welchem Vertex ein bestimmtes Matrixelement zuzuordnen ist. Hierzu zwei Beispiele:

1. Die Größe von V_{ud} bestimmt den Zerfall des Neutrons,

$$n \rightarrow p e^- \bar{\nu}_e.$$

Denn im Quarkbild gilt $n = (ddu)$ und der Zerfall verläuft über ein virtuelles W^- -Eichboson: $d \rightarrow u W^-$.

2. Die Größe von V_{us} bestimmt den Zerfall der geladenen K -Mesonen, z.B.

$$K^+ \rightarrow \mu^+ \nu_\mu.$$

Denn im Quarkbild gilt $K^+ = (\bar{s}u)$ und der Zerfall verläuft über ein virtuelles W^+ -Eichboson: $\bar{s}u \rightarrow W^+$.

Die CKM-Matrix der Leptonen schreiben wir so:

$$V_{\text{CKM}}^e = \begin{pmatrix} V_{11} & V_{12} & V_{13} \\ V_{21} & V_{22} & V_{23} \\ V_{31} & V_{32} & V_{33} \end{pmatrix}$$

Im Rahmen des Minimalen Standardmodells (MSM) wurde angenommen, daß alle Neutrinomassen gleich Null sind. Eine Entartung $m_{\nu_e} = m_{\nu_\mu} = m_{\nu_\tau}$ reicht bereits aus, um eine neue ‘physikalische’ Basis von Neutrinofeldern durch die Transformation $\mathbf{n}' = (V_{\text{CKM}}^e)^* \mathbf{n}$ einzuführen mit dem Ergebnis, daß die geladenen Ströme numehr anstelle der CKM-Matrix V_{CKM}^e die Einheitsmatrix $\mathbb{1}_3$ enthalten. Mit anderen Worten, im MSM gab es keine *flavor*-ändernden Wechselwirkungen der Leptonen.

Bestehende Experimente deuten auf eine Verletzung der angenommenen Massen-Entartung bei den Neutrinos. Eine nicht-diagonale CKM-Matrix der Leptonen zwingt uns zur Erkenntnis, daß es zwar eine Erhaltung der Leptonenzahl $L = L_e + L_\mu + L_\tau$, aber keine separate Erhaltung von L_e , L_μ und L_τ gibt. Der Zerfall des Müons etwa verläuft danach über vier Prozesse:





Die vier möglichen Endzustände lassen sich auch durch Neutrino-Oszillationen erklären.

Sind die Massen m_{ν_e} und m_{ν_μ} sehr nahe beieinander, so erwartet man Übergänge $\nu_e \rightleftharpoons \nu_\mu$ auf dem Wege Sonne-Erde oder beim Durchgang durch die Erde, im wesentlichen auf der Basis der Diagramme



Fazit: *Flavor-ändernde Prozesse im Standardmodell werden durch (und nur durch) die Wechselwirkung mit den W-Bosonen hervorgerufen.*

2 Die Brownsche Bewegung

The main advantages of a discrete approach are pedagogical, inasmuch as one is able to circumvent various conceptual difficulties inherent to the continuous approach. It is also not without a purely scientific interest. . .

Marc Kac

Zufallsbewegungen von mikroskopischen Teilchen in einer Flüssigkeit, wie sie zum erstenmal von dem britischen Botaniker Brown 1827 beobachtet wurden, gaben Anlaß zur Entwicklung einer mathematischen Disziplin, der *Theorie der Brownschen Bewegung*, mit ungeahnter Tragweite für die gesamte Physik. Die heutigen Anwendungen reichen von der Astronomie bis zur Physik der Elementarteilchen.

2.1 Die eindimensionale Zufallsbewegung

Man denke an ein Teilchen, das sich entlang der x-Achse bewegt, so daß es in der Zeiteinheit τ einen Schritt nach rechts oder nach links macht mit der Schrittweite h . In unserem Modell sind also sowohl der Raum als auch die Zeit diskret (diskontinuierlich). Darüberhinaus ist der Raum quasi-eindimensional, nämlich durch eine Folge von äquidistanten Punkten ersetzt.

Wirkt kein äußerer Einfluß, der “rechts” vor “links” bevorzugt, so sind die Wahrscheinlichkeiten für den Rechtsschritt und den Linksschritt einander gleich, also gleich $\frac{1}{2}$, und damit ist allgemein die Wahrscheinlichkeit für den Übergang vom Platz $x = jh$ zum Platz $x = ih$ während der Zeit $t = \tau$ durch die Funktion

$$P(ih - jh, \tau) = \begin{cases} \frac{1}{2} & |i - j| = 1 \\ 0 & \text{sonst} \end{cases} \quad (i, j \in \mathbb{Z}) \quad (10)$$

beschrieben. Es handelt sich hier, wollen wir dem üblichen Sprachgebrauch folgen, um einen stochastischen Prozeß, genauer, um eine *Markov-Kette* mit abzählbar vielen Zuständen. Der Prozeß ist

1. *homogen*: P hängt nur von der Differenz $i - j$ ab.
2. *isotrop*: P hängt nicht von der Richtung im Raum ab, d.h. P ist invariant gegenüber der Ersetzung $(i, j) \rightarrow (-i, -j)$.

Allgemein kann man eine Markov-Kette durch ein Paar (P, p) charakterisieren, wobei $P = (P_{ij})$ die "Übergangsmatrix" und $p = (p_i)$ die Anfangsverteilung beschreibt: p_i ist die Wahrscheinlichkeit, das Teilchen zur Zeit $t = 0$ im Zustand i zu finden. Es gilt immer $0 \leq p_i \leq 1$, $\sum_i p_i = 1$, $0 \leq P_{ij} \leq 1$ und $\sum_i P_{ij} = 1$. In unserer Situation ist der Zustand i mit dem Aufenthalt im Punkt $x = ih$ gleichzusetzen, und die Matrix P hat die Komponenten

$$P_{ij} = P(ih - jh, \tau) \quad (11)$$

Diese Matrix ist beidseitig unendlich: $-\infty < i, j < \infty$. Nach Verstreichen der Zeit $n\tau$ ($n \in \mathbb{N}$) errechnen wir die neuen Übergangswahrscheinlichkeiten als

$$P(ih - jh, n\tau) = (P^n)_{ij} \quad (12)$$

wobei $P^n = P \cdot P \cdots P$ (n Faktoren) das n -fache Matrixprodukt bezeichnet. Ist die Position des Teilchens zur Zeit $t = 0$ mit Sicherheit bekannt, etwa $x = 0$, so gilt $p_i = 0$ für $i \neq 0$ und $p_0 = 1$. Nach Verstreichen der Zeit $n\tau \geq 0$ entsteht daraus die Verteilung $P^n p$. Mit anderen Worten, P^n ist der Evolutionsoperator des Systems, und die Zeit ist grundsätzlich nur positiver Werte fähig.

Die Operatoren

$$R = \begin{pmatrix} \ddots & & & & 0 \\ 1 & 0 & & & \\ & \ddots & \ddots & & \\ & & 1 & 0 & \\ 0 & & & \ddots & \ddots \end{pmatrix} \quad L = \begin{pmatrix} \ddots & \ddots & & & 0 \\ & 0 & 1 & & \\ & & \ddots & \ddots & \\ & & & 0 & 1 \\ 0 & & & & \ddots \end{pmatrix}$$

verschieben das Teilchen nach rechts bzw. nach links um die vorgegebene Schrittweite h . Es gilt $L = R^{-1}$, insbesondere also $RL = LR$. Die unserem Modell zugrunde liegende Übergangsmatrix P läßt sich nun so darstellen:

$$P = \frac{1}{2}(R + L) \quad (13)$$

Eine unmittelbare Folge davon ist

$$P^n = \frac{1}{2^n} \sum_{k=0}^n \binom{n}{k} R^k L^{n-k} \quad (14)$$

und wir erhalten somit die Übergangswahrscheinlichkeiten nach n Zeitschritten als

$$P(ih - jh, n\tau) = \frac{1}{2^n} \binom{n}{k} \quad i - j = k - (n - k) \quad (15)$$

Es ist leicht zu sehen, daß die Rekursionsformel

$$\binom{n+1}{k} = \binom{n}{k} + \binom{n}{k-1}$$

für die Binomialkoeffizienten (Pascalsches Dreieck!) mit der Differenzgleichung

$$P(x, t + \tau) = \frac{1}{2}P(x + h, t) + \frac{1}{2}P(x - h, t) \quad (16)$$

identisch ist, wobei wir $x = (i-j)h$ und $t = n\tau$ gesetzt haben. Die Gleichung (16) kann wie folgt umgeschrieben werden:

$$\frac{P(x, t + \tau) - P(x, t)}{\tau} = \frac{h^2}{2\tau} \frac{P(x + h, t) - 2P(x, t) + P(x - h, t)}{h^2} \quad (17)$$

Auch dies ist eine Differenzgleichung, die aber schon die Nähe zu einer Differentialgleichung erkennen läßt. Entsprechend unserer Auffassung sind nämlich sowohl h als auch τ *mikroskopische* Größen. Eine *makroskopische* Beschreibung der Zufallsbewegung erzielen wir durch den Grenzübergang $h \rightarrow 0, \tau \rightarrow 0$, wobei die *Diffusionskonstante*

$$D = \frac{h^2}{2\tau}$$

konstant gehalten wird. In diesem Limes werden x und t zu kontinuierlichen Variablen: $x \in \mathbb{R}, t \in \mathbb{R}_+$. Die Gleichung (17) geht in die (eindimensionale) *Diffusionsgleichung* über⁸:

$$\frac{\partial}{\partial t} P(x, t) = D \frac{\partial^2}{\partial x^2} P(x, t) \quad (18)$$

Diese Gleichung und ihre mehrdimensionalen Varianten sind die Basis der Einsteinschen Theorie der Brownschen Bewegung. Die Art des Grenzüberganges läßt erkennen: Die instantane Geschwindigkeit, nämlich der Quotient h/τ , besitzt keinen Limes. Vielmehr strebt der Quotient über alle Werte. Dieses Verhalten ist dafür verantwortlich, daß man dem Brownschen Teilchen keine Geschwindigkeit zuordnen kann. Mathematisch gesehen bedeutet dies, daß die Pfade der Brownschen Bewegung nichtdifferentierbare Funktionen der Zeit sind. Eine bedeutende Leistung von Einstein war die Ableitung der Beziehung $D = 2k_B T/f$ (k_B =Boltzmann-Konstante, T =Temperatur, f

⁸Bei dem Übergang zum Kontinuum muß die Funktion $P(x, t)$ mit Hilfe eines zusätzlichen Faktors h umnormiert werden, der berücksichtigt, das $\sum_i P_{ij} = 1$ in die Bedingung $\int dx P(x, t) = 1$ übergeht.

=Reibungskonstante), die es ermöglichte, die Diffusionskonstante D auf makroskopische Größen zurückzuführen⁹. Für unsere Zwecke ist diese Beziehung jedoch nicht von Interesse.

Die Diffusionsgleichung ist formal identisch mit der Wärmeleitungsgleichung. Der Unterschied liegt lediglich in der Interpretation der Funktion $P(x, t)$ und der Konstanten D . Ergebnisse, die bei der Diskussion der Wärmeleitung erzielt wurden, lassen sich somit übertragen. Zum Beispiel kennt man die Lösung

$$P_0(x, t) = \frac{1}{2\sqrt{\pi Dt}} \exp\left\{-\frac{x^2}{4Dt}\right\} \quad (t > 0) \quad (19)$$

des Anfangswertproblems $P_0(x, 0) = \delta(x)$ (das Brownsche Teilchen startet im Ursprung). Das klassische Theorem von Laplace-De Moivre (Konvergenz der Binomialverteilung gegen die Gauß-Verteilung) sorgt dafür, daß im Kontinuumsmites die Gauß-Funktion P_0 an die Stelle der Übergangswahrscheinlichkeit P tritt:

$$\lim_{\substack{x_1 < ih < x_2 \\ jh \rightarrow x_0 \\ n\tau \rightarrow t}} \sum P(ih - jh, n\tau) = \frac{1}{2\sqrt{\pi Dt}} \int_{x_1}^{x_2} dx \exp\left\{-\frac{(x - x_0)^2}{4Dt}\right\} \quad (20)$$

Dies ist, historisch gesehen, der erste bekannt gewordene Fall eines **Grenzwertsatzes** der Wahrscheinlichkeitstheorie. Das Integral

$$W(A, t) = \int_A dx P_0(x, t) \quad (21)$$

stellt die Wahrscheinlichkeit dar, daß sich das Teilchen zur Zeit t im Gebiet $A \subset \mathbb{R}$ aufhält. Die Normierung $\int dx P_0(x, t) = 1$ ist zeitunabhängig und sorgt dafür, daß $0 \leq W(A, t) \leq 1$ zu allen Zeiten gilt.

An die Stelle der trivialen Matrixidentität $P^n P^m = P^{n+m}$ tritt, bei dem Übergang zum Kontinuum, die *Chapman-Kolmogorov-Gleichung*

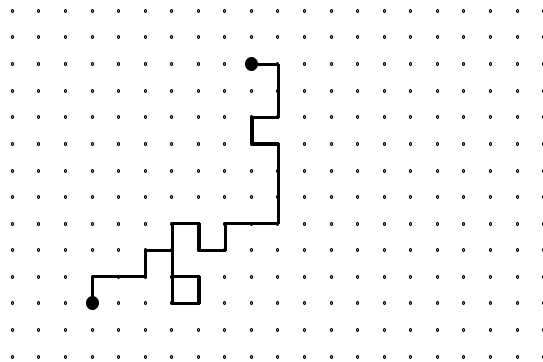
$$\int dx' P_0(x - x', t) P_0(x' - x'', t') = P_0(x - x'', t + t') \quad (22)$$

Sie ist Ausdruck der zeitlichen Homogenität des stochastischen Prozesses.

⁹Für kugelförmige Brownsche Teilchen gilt die Stokesche Formel. Mit ihrer Hilfe kann f durch den Radius des Teilchens und die Viscosität der Umgebung ausgedrückt werden. Durch Experimente an Brownschen Teilchen kann also die Größe von k_B , oder wegen $k_B = R/N$ auch die Avogadro-Zahl N bestimmt werden. Für die Bestimmung von N auf diesem Wege erhielt Perrin 1926 den Nobelpreis.

2.2 Die d -dimensionale Irrfahrt

Wir verallgemeinern die Betrachtungen des vorigen Abschnittes und kommen nun zu der Zufallsbewegung eines Teilchens auf dem d -dimensionalen kubischen Gitter $(\mathbb{Z}h)^d$ mit der Gitterkonstanten h . Eine solche Irrfahrt könnte – auf einem zweidimensionalen Gitter – etwa den folgenden Verlauf nehmen:



Betrachten wir zeitliche Entwicklungen dieser Art jedoch aus großer Ferne und lassen wir dem Teilchen genügend Zeit, sein Irrfahrt durch den Raum fortzusetzen, so bietet sich ein Bild, das die Gitterstruktur kaum noch erkennen läßt. Je feiner das Gitter, umso chaotischer die Bewegung:

In der Zeiteinheit τ hat das Teilchen die Freiheit, in eine der $2d$ Richtungen des Gitters einen Schritt der Länge h auszuführen. Die Wahrscheinlichkeit – für alle Richtungen gleich – ist $(2d)^{-1}$. Im eindimensionalen Fall war es bequem, die Matrixnotation für den Übergang zu verwenden. Im mehrdimensionalen Fall erweist sich die Operatornotation als wesentlich günstiger, d.h. anstelle der Übergangsmatrix benutzen wir nun den durch sie induzierten linearen Operator P :

$$[Pf](x) = \frac{1}{2d} \sum_{k=1}^d \{f(x + he_k) + f(x - he_k)\} \quad (23)$$

Die Ortsvariable x ist hier nur diskreter Werte fähig: $x \in (\mathbb{Z}h)^d$; e_k ist der Einheitsvektor in Richtung der k ten Koordinatenachse, also $(e_k)^i = \delta_k^i$. Ist $0 \leq f(x) \leq 1$ und $\sum_x f(x) = 1$, so kann f als eine Verteilungsfunktion für den Aufenthalt des Brownschen Teilchen zur Zeit t gedeutet werden. In diesem Fall wäre Pf die entsprechende Funktion zur Zeit $t + \tau$. Es ist jedoch nicht nur bequem, sondern aus mathematischen Gründen geradezu zwingend, hier einen größeren Raum von Funktionen f zuzulassen, so daß darin die Spektralzerlegung des Operators P vorgenommen werden kann, etwa den Hilbertraum

$$\mathcal{H} = \{f \mid \sum_x |f(x)|^2 < \infty\} \quad .$$

Auf \mathcal{H} ist P selbstadjungiert und beschränkt. Die Potenzen P^n haben wir besser im Griff, sobald die Spektralzerlegung von P bekannt ist. Eine Fourier-Transformation

$$\begin{aligned} f(x) &= \int_B dp e^{ipx} \tilde{f}(p) & dp &= dp_1 \cdots dp_d \\ \tilde{f}(p) &= \left(\frac{h}{2\pi}\right)^d \sum_x e^{-ipx} f(x) & px &= p_1 x^1 + \cdots + p_d x^d \end{aligned}$$

leistet das Gewünschte. Das Integrationsgebiet für den Impuls p ist die *erste Brillouin-Zone*

$$B = \{p \in \mathbb{R}^d \mid -\pi/h \leq p_i \leq \pi/h, i = 1, \dots, d\} \quad (24)$$

Wir erhalten so:

$$[\widetilde{Pf}](p) = \lambda(p) \tilde{f}(p) \quad (25)$$

$$\lambda(p) = \frac{1}{d} \sum_{i=1}^d \cos(p_i h) \quad (26)$$

$$\text{spec } P = \{\lambda(p) \mid p \in B\} \quad . \quad (27)$$

Das Spektrum des Operators P ist somit kontinuierlich. Durch

$$[P^n f](x) = \sum_{x'} P(x - x', n\tau) f(x') \quad (n \in \mathbb{N}) \quad (28)$$

wird $P(x - x', n\tau)$ zur Wahrscheinlichkeit für den Übergang $x' \rightarrow x$ während eines Zeitintervalls der Länge $n\tau$. Explizit haben wir:

$$P(x, n\tau) = \left(\frac{h}{2\pi}\right)^d \int_B dp e^{ipx} \lambda(p)^n \quad (29)$$

Der *Kontinuumslimes* besteht nun darin, daß wir, wie im vorigen Abschnitt, sowohl die Gitterkonstante h wie auch den Zeitschritt τ so gegen Null streben lassen, daß dabei die Diffusionskonstante

$$D = \frac{h^2}{2\tau d} \quad (30)$$

konstant gehalten wird. Die Brillouin-Zone wächst monoton, bis sie schließlich ganz \mathbb{R}^d umfaßt.

Wir finden für kleine Werte von h (große Werte von $n = t/\tau$):

$$\begin{aligned} \lambda(p)^n &= \exp \left\{ n \log \left(\frac{1}{d} \sum_{i=1}^d \cos p_i h \right) \right\} \\ &= \exp \left\{ \frac{t}{\tau} \log \left(1 - \frac{h^2}{2d} \|p\|^2 + O(h^4) \right) \right\} \\ &= \exp \left\{ -Dt \|p\|^2 + O(h^2) \right\} \quad (t > 0) \end{aligned}$$

mit $\|p\|^2 = \sum_i p_i^2$. Die Wahrscheinlichkeit pro Volumen, $h^{-d}P(x, t)$, strebt daher im Kontinuumslimes gegen die Dichte

$$\begin{aligned} P_0(x, t) &= (2\pi)^{-d} \int dp e^{ipx} e^{-Dt \|p\|^2} \\ &= (4\pi Dt)^{-d/2} \exp \left\{ -\frac{\|x\|^2}{4Dt} \right\} \quad (t > 0) \quad (31) \end{aligned}$$

Wie man sieht, handelt es sich hierbei um eine Gauß-Verteilung, deren Breite wie \sqrt{t} anwächst. Genau betrachtet, ist $P_0(x, t)$ die Wahrscheinlichkeitsdichte für den Aufenthalt des Brownschen Teilchens, wenn bekannt ist, daß es zur Zeit $t = 0$ im Ursprung startete. Als *mittlere quadratische Auslenkung*, abhängig von t , bezeichnet man den Erwartungswert von $\|x\|^2$:

$$\langle \|x\|^2 \rangle_t = \int dx \|x\|^2 P_0(x, t) = 2dDt \quad (32)$$

Die Proportionalität mit t ist charakteristisch. Bei Beobachtungen unter dem Mikroskop (effektiv: $d = 2$) läßt sich auf diese Weise leicht die Diffusionskonstante bestimmen.

Wir machen die folgende Beobachtung: Obwohl das kubische Gitter nur eine eingeschränkte Rotationssymmetrie besitzt, stellt der Kontinuumsliches die volle Rotationssymmetrie des \mathbb{R}^d wieder her, indem die Dichte $P_0(x, t)$ eine Funktion von des euklidischen Abstandes $\|x\|$ des Punktes x vom Ursprung ist. Dies ist für Grenzprozesse dieser Art keineswegs selbstverständlich und muß als ein Geschenk betrachtet werden. Es ist leicht, Gegenbeispiele zu konstruieren. Angenommen, die Spektralfunktion auf dem Gitter sähe so aus:

$$\lambda(p) = 1 - \{d^{-1} \sum_{i=1}^d |\sin p_i h|\}^2$$

Diese Funktion ist invariant unter allen Spiegelungen und Rotationen des Gitters. Im Kontinuumsliches entsteht jedoch ein ungewöhnlicher Ausdruck,

$$\lim \lambda(p)^n = \exp\{-D't(\sum_i |p_i|)^2\}$$

($D' = \lim h^2/(\tau d^2) = 2D/d$), der die erwartete Rotationssymmetrie vermissen läßt.

Kehren wir zum Resultat (31) zurück. Man überzeugt sich leicht, daß die Gauß-Funktion $P_0(x, t)$ die d -dimensionale Diffusionsgleichung erfüllt:

$$\frac{\partial}{\partial t} P_0(x, t) = D \Delta P_0(x, t) \quad (33)$$

Hier bezeichnet Δ den d -dimensionalen Laplace-Operator. Uns interessiert daran die formale Ähnlichkeit mit der Schrödinger-Gleichung eines freien Teilchens: Wir gelangen von der statistischen Mechanik zur Quantenmechanik, rein formal betrachtet, durch die Einführung einer imaginären Zeit.

2.3 Imaginäre Zeit

Die Schrödinger-Gleichung für ein freies Teilchen der Masse $m = 1$ kann so geschrieben werden, daß schon durch die bloße Schreibweise die Einführung der Variablen it anstelle von t nahegelegt wird:

$$\frac{1}{2} \Delta \psi = \frac{\partial}{\partial(it)} \psi \quad (34)$$

Indem wir bei quantenmechanischen Rechnungen konsequent die imaginäre Zeitvariable it in allen Ausdrücken benutzen, können wir etwa die Lösung des Anfangswertproblems in der Form

$$\psi(x, it) = \int d^3x' K(x - x', it) \psi(x', 0) \quad (35)$$

angeben¹⁰, wobei

$$K(x, it) = \begin{cases} (2\pi it)^{-3/2} \exp(-(2it)^{-1}x^2) & t \neq 0 \\ \delta^3(x) & t = 0 \end{cases} \quad (36)$$

der Integralkern des unitären Operators $e^{it\Delta/2}$ ist, der im Falle der Quantenmechanik die zeitliche Evolution von Zuständen beschreibt:

$$\psi(x, it) = [e^{it\Delta/2}\phi](x) \quad (t \in \mathbb{R}) \quad (37)$$

$$\psi(x, 0) = \phi(x) \quad (38)$$

Das Erstaunliche angesichts dieser ersten kurzen Liste von Formeln ist, daß tatsächlich an allen Plätzen die imaginäre Variable it in natürlicher Weise auftritt, so als ob i und t für immer untrennbar verbunden sind. Es ist auch eine bekannte Tatsache, daß, indem wir t variieren, die Operatoren $e^{it\Delta/2}$ eine einparametrische unitäre Gruppe beschreiben. Für den Integralkern bedeutet dies die Gültigkeit einer Gleichung, die der Chapman-Kolmogorov-Gleichung völlig analog ist, nämlich

$$\int d^3x' K(x - x', it)K(x' - x'', it') = K(x - x'', it + it') \quad (39)$$

Gewisse Unterschiede gilt es allerdings im Auge zu behalten:

- Die Zeit t ist nicht auf die Halbachse \mathbb{R}_+ allein beschränkt; alle reellen Werte treten gleichberechtigt auf. Die Zeitrichtung ist umkehrbar. Eine Richtung, in der die Zeit abläuft, ist schon deshalb aus der Struktur der Quantenmechanik nicht ableitbar.
- Der Integralkern $K(x, it)$ ist nicht positiv, sondern komplex. Er hat einen oszillatorischen Charakter. Die Schrödinger-Gleichung, im Gegensatz zur Diffusionsgleichung, besitzt wellenartige Lösungen.

Eine bemerkenswerte Eigenschaft des Kernes K , die in der Streutheorie von ausschlaggebender Bedeutung ist, weil sie für die zeitliche Konvergenz der Streuzustände im Wechselwirkungsbild verantwortlich ist, kommt in der folgenden Formel zum Ausdruck:

$$|K(x, it)| = |2\pi t|^{-3/2} \quad (t \neq 0) \quad (40)$$

Die daraus resultierende Eigenschaft

$$|\psi(x, it)| \leq \int d^3x' |K(x - x', it)| |\psi(x', 0)| = |2\pi t|^{-3/2} \int d^3x' |\psi(x', 0)| \quad (41)$$

¹⁰Es ist zu betonen, daß, wo früher $\psi(x, t)$ stand, jetzt $\psi(x, it)$ geschrieben wird. Eigentlich müßten wir im Zuge der neuen Auffassung auch ein neues Funktionssymbol benutzen.

ist unter dem Namen *Zerfließen des Wellenpaketes* bekannt. Sie setzt, wie man sieht, die Konvergenz des rechten Integrals voraus. Der Exponent $-3/2$ ist hier charakteristisch für die Dimension $d = 3$. Allgemein gesprochen, in einer d -dimensionalen Quantenmechanik nämlich, strebt $|\psi(x, it)|$ wie $|t|^{-d/2}$ gegen Null, sobald $\psi(x, 0)$ absolut integrierbar ist.

Wir kommen nun zu unserem eigentlichen Thema, der Beziehung zwischen der Diffusionsgleichung (in drei Dimensionen) und der Schrödinger-Gleichung, und machen dazu folgende Feststellung:

Die Lösung $\psi(x, it)$ der Schrödinger-Gleichung ist Randwert einer analytischen Funktion $\psi(x, z)$, definiert in der Halbebene $\Re z > 0$ und gegeben durch das Integral

$$\psi(x, z) = \int d^3x' K(x - x', z)\psi(x', 0) \quad (42)$$

mit

$$K(x, z) = (2\pi z)^{-3/2} \exp\left(-\frac{x^2}{2z}\right). \quad (43)$$

Die Bedingung $\Re z > 0$ ist für die Konvergenz des Integrals erforderlich; für $\Re z < 0$ würde der Integrand exponentiell anwachsen. Eine Grenzsituation, die Situation der Quantenmechanik, stellt $\Re z = 0$ dar: Hier hängt es von der Wahl von $\psi(x, 0)$ ab, ob das Integral (42) konvergent ist oder nicht¹¹. Um sicher zu gehen, sollte man in jedem Fall $\psi(\cdot, it) \in L^2(\mathbb{R}^3)$ als *Randwert* der zugehörigen analytischen Funktion auffassen:

$$\psi(\cdot, it) = \lim_{s \downarrow 0} \psi(\cdot, s + it) \quad (44)$$

In der rechten z -Halbebene eingebettet liegt die rechte Halbachse $z = s \geq 0$. Auf ihr verwandelt sich die Schrödinger-Gleichung in die Diffusionsgleichung mit der Diffusionskonstanten $D = \frac{1}{2}$ (indem wir die Masse m und \hbar wieder einführen: $D = \hbar^2/(2m)$). Während die zeitliche Evolution in der Quantenmechanik durch eine unitäre Gruppe $e^{it\Delta/2}$ beschrieben wird, bilden die entsprechenden Operatoren $e^{s\Delta/2}$ für die Brownsche Bewegung nur eine *Halbgruppe*, da sie nicht invertierbar sind und somit die Einschränkung $s \geq 0$ nicht überwunden werden kann. Der Verlust der Gruppeneigenschaft bei dem Übergang $it \rightarrow s$ wird jedoch wettgemacht durch zwei wichtige neue Eigenschaften, die wir entlang der Halbachse $z = s \geq 0$ finden:

1. Der Integralkern $K(\cdot, s)$ besitzt eine strikt positive Fourier-Transformierte (vgl. (1.23)). Für alle (komplexen) Wellenfunktionen ϕ gilt deshalb

$$(\phi, e^{s\Delta/2} \phi) = (2\pi)^{-3/2} \int d^3x \int d^3x' \bar{\phi}(x) K(x - x', s) \phi(x') \geq 0 \quad (45)$$

¹¹Die Bedingung $(2\pi)^{-3/2} \int d^3x |\psi(x, 0)| < \infty$ ist sicher hinreichend für die Konvergenz.

wobei das rechte Gleichheitszeichen nur für $\phi = 0$ angenommen wird.

2. Der Integralkern selbst ist strikt positiv: $K(x, s) > 0$. Aus $\phi(x) \geq 0$ folgt deshalb stets $[e^{s\Delta/2}\phi](x) = \int d^3x' K(x-x', s)\phi(x') \geq 0$. Man sagt, die Halbgruppe $e^{s\Delta/2}$ erhält die Positivität.
3. Der Integralkern ist normiert: $(2\pi)^{-3/2} \int d^3x K(x, s) = 1$. Dies hat zur Konsequenz, daß die konstante Funktion $\phi(x) = 1$ stationär ist.

Der hier vorgetragenen Auffassung zufolge benutzen Quantentheorie und Feldtheorie eine *imaginäre* Zeitvariable it , die statistische Mechanik hingegen eine *reelle* Zeitvariable s . Man kann genau so gut auch die umgekehrte Auffassung vertreten. Jedoch, angesichts der pseudo-euklidischen Struktur des Minkowski-Raumes wurde schon frühzeitig eine Beschreibung der Feldtheorie nahegelegt, bei der $ix^0 = x^4$ gesetzt und mithin die gewöhnliche Zeit x^0 zugunsten einer rein imaginären Zeit x^4 aufgegeben wurde. Es ist in der Tat dieser zwei Generationen alte, oft geschmähte Standpunkt, den wir hier zu neuem Leben erwecken, die Idee der analytischen Fortsetzung benutzend.

Nachdem nun klar geworden ist, daß Lösungen der Schrödinger-Gleichung nichts anderes sind als analytische Fortsetzungen von Lösungen der Diffusionsgleichung und daß die Diffusionsgleichung die zeitliche Evolution für den statistischen Aufenthalt eines Brownschen Teilchens beschreibt, bleibt zu klären, wie man die Brownschen Pfade für die Zwecke der Quantenmechanik nutzbar machen kann. Die Einführung des Pfadintegrals, die unser Ziel ist, basiert auf der Konstruktion des Wiener-Maßes, und dieses verlangt zuvor eine Diskussion des Wiener-Prozesses.

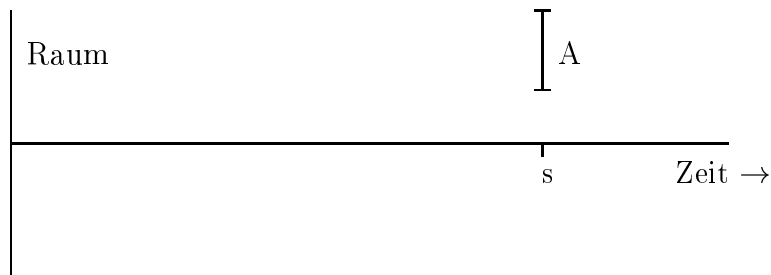
2.4 Der Wiener-Prozeß (d=3)

2.4.1 Die Analysis zufälliger Pfade

Ein Brownsches Teilchen mit der Diffusionskonstanten $D = \frac{1}{2}$ starte zur Zeit $s = 0$ im Punkt $x = 0 \in \mathbb{R}^3$. Der Ort dieses Teilchens zu einem späteren Zeitpunkt $s > 0$ ist eine bestimmte Zufallsvariable, die wir mit X_s bezeichnen. Es ist nicht möglich (d.h. ohne Verwirrung zu stiften), den Ort einfach mit x oder x_s zu bezeichnen, weil das Symbol x immer einen *bestimmten Ort* meint, also ein festes oder auch variables *Ereignis* kennzeichnet¹². Alle Punkte $x \in \mathbb{R}^3$ sind eben nur mögliche Werte, die die Zufallsvariable X_s annehmen kann. Ein wirkliches, also feststellbares oder meßbares Ereignis, dem eine

¹²In der Sprache der mathematischen Stochastik ist X_s eine *Funktion* auf dem Raum Ω der Elementarereignisse: dies ist der Raum aller Brownschen Pfade ω . Jeder individuelle Pfad ist eine Funktion $\omega : \mathbb{R}_+ \rightarrow \mathbb{R}^3$, $s \mapsto \omega(s)$, und es gilt $X_s(\omega) = \omega(s)$.

endliche Wahrscheinlichkeit zugeordnet werden kann, lautet: $X_s \in A$, wobei A irgendeine meßbare Teilmenge des \mathbb{R}^3 bezeichnet. Wenn wir den zufälligen Brownschen Pfad zeichnerisch veranschaulichen, so bedeutet ein solches Ereignis, daß der Pfad durch das Fenster A zum Zeitpunkt s hindurchgeht:



Die Zufallsvariable X_s gilt als bekannt, sobald für jedes $A \subset \mathbb{R}^3$ die Wahrscheinlichkeit $P(X_s \in A)$ definiert ist. Die Vorschrift, die jeder Menge A die Wahrscheinlichkeit $P(X_s \in A)$ zuordnet, heißt die *Verteilung* von X_s . Jede solche Verteilung wird auch ein Wahrscheinlichkeitsmaß, kurz ein **W-Maß** auf dem Raum \mathbb{R}^3 genannt.

Im Fall der Brownschen Pfade mit $D = \frac{1}{2}$ gilt, wie im Abschnitt 1.2 erläutert,

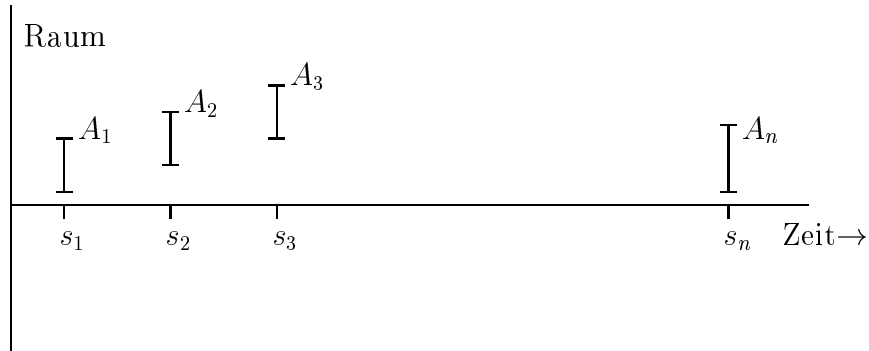
$$P(X_s \in A) = \int_A d^3x K(x, s) \quad (46)$$

mit der im Abschnitt 1.3 angegebenen Dichte $K(x, s)$. Da diese Dichte insbesondere eine Gauß-Funktion ist, sagt man, X_s sei *Gaußisch verteilt* und nennt X_s eine *Gaußische Zufallsvariable*.

Eine Abbildung $s \mapsto X_s$, die jedem $s \in \mathbb{R}_+$ eine Zufallsvariable X_s zuordnet, nennt man einen *stochastischen Prozeß*. Ein solcher Prozeß ist dann definiert, wenn eine Vorschrift formuliert ist, die Wahrscheinlichkeit eines *allgemeinen* Ereignisses zu berechnen. Ein allgemeines Ereignis hat die Form

$$X_{s_1} \in A_1 \text{ und } X_{s_2} \in A_2 \text{ und } \dots X_{s_n} \in A_n$$

mit $0 < s_1 < s_2 < \dots < s_n$ und $A_i \subset \mathbb{R}^3$, wobei $n \in \mathbb{N}$ beliebig ist. Es muß also eine Antwort geben auf die Frage mit welcher Wahrscheinlichkeit passiert ein Brownsches Teilchen, das im Ursprung startete, der Reihe nach die Fenster A_1, \dots, A_n zu vorgegebenen Zeiten:



Es ist üblich, diese Wahrscheinlichkeit mit $P(X_{s_1} \in A_1, \dots, X_{s_n} \in A_n)$ zu bezeichnen. Es handelt sich hierbei um die gemeinsame Verteilung der n Zufallsvariablen X_{s_1}, \dots, X_{s_n} . Die Abbildung $A_1 \times \dots \times A_n \mapsto P(X_{s_1} \in A_1, \dots, X_{s_n} \in A_n)$ wird dann eine *n -dimensionale Verteilung* des Prozesses genannt.

Der stochastische Prozeß X_s heißt **Wiener-Prozeß**¹³, wenn die n -dimensionalen Verteilungen die Form

$$\begin{aligned}
 P(X_{s_1} \in A_1, \dots, X_{s_n} \in A_n) = & \\
 & \int_{A_n} d^3x_n \cdots \int_{A_2} d^3x_2 \int_{A_1} d^3x_1 K(x_n - x_{n-1}, s_n - s_{n-1}) \\
 & \cdots K(x_2 - x_1, s_2 - s_1) K(x_1, s_1) \quad (47)
 \end{aligned}$$

haben und wenn für die Anfangsverteilung gilt: $P(X_0 \in A) = 1$ falls $A \ni 0$ und $= 0$ sonst. Die Dichte $K(x, s)$ ist die (1.35) angegebene Funktion. Wir haben uns hier auf die Dimension $d = 3$ und die Diffusionskonstante $D = \frac{1}{2}$ festgelegt. Inhaltlich drückt die Formel (1.39) folgendes aus: die Kenntniß darüber, welchen Ort x_1 das Teilchen zur Zeit s_1 erreicht hat, reicht aus, um den weiteren Verlauf der Bewegung im Intervall $[s_1, s_2]$ mit Hilfe der Übergangswahrscheinlichkeit zu bestimmen. Und dies ist hierbei wesentlich: der Weg, den das Teilchen bis zum Erreichen seiner Position zur Zeit s_1 genommen hat, ist irrelevant für die weitere Bewegung (Nur der gegenwärtige Zustand, nicht seine Vergangenheit, beeinflußt die Zukunft). Man sagt auch, der Prozeß habe *kein Gedächtnis*, und nennt Prozesse mit dieser Eigenschaft *Markov-Prozesse*. Markov-Prozesse sind somit sehr einfach strukturiert. Wie auch immer $K(x, s)$ aussehen mag, ein Markov-Prozeß ist bereits vollständig

¹³So benannt nach dem Mathematiker Norbert Wiener.

durch die bedingte Wahrscheinlichkeit

$$P(X_{s'} \in A | X_s = x) = \int_A d^3x' K(x' - x, s' - s) \quad (s' > s) \quad (48)$$

und durch die Anfangsverteilung $P(X_0 \in A)$ festgelegt. Mit $P(X_{s'} \in A | X_s = x)$ bezeichnet man allgemein die Wahrscheinlichkeit für das Ereignis $X_{s'} \in A$ unter der Voraussetzung $X_s = x$: das Teilchen startete zur Zeit s in x . Ein Markov-Prozeß heißt *zeitlich homogen*, wenn $P(X_{s'} \in A | X_s = x)$ nur eine Funktion der Differenz $s' - s$ ist. Der Wiener-Prozeß ist homogen.

2.4.2 Gaußische Prozesse

Es ist möglich die Formel (1.39) sehr viel kompakter zu schreiben und durch die neue Schreibweise ihre Struktur zu erhellen. Es sei also n fest gewählt und $x = \{x_1, x_2, \dots, x_n\}^T \in \mathbb{R}^{3n}$ der Multivektor eines Elementarereignisses. Wir schreiben auch $dx = d^3x_1 d^3x_2 \cdots d^3x_n$. Durch

$$x^T Q x = \frac{x_1^2}{s_1} + \frac{(x_2 - x_1)^2}{s_2 - s_1} + \cdots + \frac{(x_n - x_{n-1})^2}{s_n - s_{n-1}} \quad (49)$$

$(0 < s_1 < s_2 < \cdots < s_n)$ ist eine positive quadratische Form definiert; Q selbst ist eine $3n \times 3n$ -Matrix. Sie ist reell, symmetrisch und positiv. Man kann sie durch eine reelle Ähnlichkeitstransformation $Q = M^T D M$ in Diagonalgestalt bringen:

$$M = \begin{pmatrix} \mathbf{1} & & & 0 \\ -\mathbf{1} & \mathbf{1} & & \\ & \ddots & \ddots & \\ 0 & & -\mathbf{1} & \mathbf{1} \end{pmatrix} \quad D = \begin{pmatrix} s_1^{-1} \mathbf{1} & & & 0 \\ & (s_2 - s_1)^{-1} \mathbf{1} & & \\ & & \ddots & \\ 0 & & & (s_n - s_{n-1})^{-1} \mathbf{1} \end{pmatrix}$$

Wir haben uns hier der Blockdarstellung bedient und mit $\mathbf{1}$ die 3×3 -Einheitsmatrix bezeichnet. Da $\det M = 1$ ist, folgt

$$\det Q = \det D = [s_1(s_2 - s_1) \cdots (s_n - s_{n-1})]^{-3} \quad (50)$$

Mit dem cartesischen Produkt $A = A_1 \times A_2 \times \cdots \times A_n$ können wir nun schreiben:

$$P(\{X_{s_1}, X_{s_2}, \dots, X_{s_n}\} \in A) = \left[\det \left(\frac{Q}{2\pi} \right) \right]^{\frac{1}{2}} \int_A dx \exp\{-\frac{1}{2} x^T Q x\}$$

(51)

Diese Formel gestattet zwei Verallgemeinerungen unseres Ansatzes:

1. Q könnte irgendeine nichtsinguläre positive Matrix sein. Dann würde man immer noch von einer $3n$ -dimensionalen Gaußischen Verteilung sprechen. Sind alle multidimensionalen Verteilungen eines stochastischen Prozesses Gaußisch, so heißt er ein **Gauß-Prozeß**. In diesem Sinne ist der Wiener-Prozeß ein spezieller Gauß-Prozeß.
2. Die Teilmenge $A \subset \mathbb{R}^{3n}$ könnte eine beliebige (meßbare) Menge sein, also eine, die sich nicht als ein cartesisches Produkt darstellen läßt. In diesem Fall ist das Ereignis $\{X_{s_1}, X_{s_2}, \dots, X_{s_n}\} \in A$ nicht mehr mit einem Ereignis der Art $X_{s_1} \in A_1$ und $X_{s_2} \in A_2$ und \dots $X_{s_n} \in A_n$ identisch. Die Rechtfertigung für diese Verallgemeinerung liegt darin, daß man eine beliebige Menge A immer als Vereinigung disjunkter Mengen schreiben kann, wobei jede dieser Mengen für sich genommen ein cartesisches Produkt darstellt (Parkettierung).

2.4.3 Unabhängige Zuwächse

Wir kommen nun zu einer einfachen Anwendung der Formel (51) für $n = 2$. Es sei $G \subset \mathbb{R}^3$ ein beliebiges Gebiet und

$$A = \{x_1, x_2 \mid x_2 - x_1 \in G\} \subset \mathbb{R}^6 \quad (52)$$

Wir können uns A als einen beidseitig unendlichen Zylinder im sechsdimensionalen Raum vorstellen, dessen Basis die Menge G ist. Die Berechnung des Wertes von $P(\{X_{s_1}, X_{s_2}\} \in A)$ beantwortet die Frage: *Mit welcher Wahrscheinlichkeit nimmt der Zuwachs $x_2 - x_1$ entlang des Brownschen Pfades zwischen den Zeiten s_1 und s_2 einen Wert in dem Gebiet G an?* Die Vorschrift (51) liefert die Antwort:

$$P(X_{s_2} - X_{s_1} \in G) = \int_G d^3y K(y, s_2 - s_1) \quad (53)$$

wobei wir die Substitution $y = x_2 - x_1$ (anstelle von x_2) vorgenommen haben, und ausnutzten, daß $\int d^3x_1 K(x_1, s_1) = 1$ ist. Das verbleibende Integral ist uns geläufig (siehe (1.38)), und damit gilt die Beziehung

$$P(X_{s_2} - X_{s_1} \in G) = P(X_{s_2-s_1} \in G) \quad (54)$$

sobald $0 \leq s_1 \leq s_2$. Das Ergebnis in Worten: *Die Zufallsvariablen $X_{s_2} - X_{s_1}$ und $X_{s_2-s_1}$ besitzen die gleiche Verteilung*¹⁴. Der Versuch, die Geschwindigkeit des Brownschen Teilchens als Zufallsvariable einzuführen, scheitert. Sei

¹⁴Warnung: Dies sagt nicht, daß $X_{s_2} - X_{s_1} = X_{s_2-s_1}$ gilt.

nämlich $V_s(\tau) = \tau^{-1}(X_{s+\tau} - X_s)$ mit $s > 0, \tau > 0$. Das Ereignis $V_s(\tau) \in G$ ist mit dem Ereignis $X_{s+\tau} - X_s \in \tau G$ identisch. Wir berechnen seine Wahrscheinlichkeit:

$$P(V_s(\tau) \in G) = (2\pi\tau)^{-3/2} \int_{\tau G} d^3x e^{-(2\tau)^{-1}x^2} = \left(\frac{\tau}{2\pi}\right)^{3/2} \int_G d^3v e^{-\tau v^2/2}$$

Die Dichte $[\tau/(2\pi)]^{3/2} \exp(-\tau v^2/2)$ wird für $\tau \rightarrow 0$ immer flacher und breiter: Es existiert *keine* Grenzverteilung. Für das Brownsche Experiment bedeutet dies, daß die genäherte Geschwindigkeit $V_s(\tau)$ beliebig große Werte mit immer größerer Wahrscheinlichkeit annimmt. Sei etwa c die Lichtgeschwindigkeit, so gibt es ein τ derart, daß $P(|V_s(\tau)| > c) > 1 - \epsilon$ gilt: Die Wahrscheinlichkeit, daß die Geschwindigkeit des Brownschen Teilchens dem Betrage nach größer als die Lichtgeschwindigkeit ist, kommt dem Wert 1 beliebig nahe, sofern man die Zeitdifferenz τ für die Messung nur beliebig klein macht. Der Wiener-Prozeß stellt somit eine Idealisierung dar, die – allzu ernst genommen – sogar wichtige physikalische Prinzipien verletzt.

Wir wollen das eingangs betrachtete Beispiel verallgemeinern. Es sei jetzt $A \subset \mathbb{R}^{3n}$ durch die Bedingungen $x_i - x_{i-1} \in G_i, i = 2, \dots, n$, definiert. Aus der Grundformel (51) folgt

$$P(\{X_{s_1}, \dots, X_{s_n}\} \in A) = \prod_{i=2}^n \int_{G_i} d^3y K(y, s_i - s_{i-1}) \quad (55)$$

($0 < s_1 < \dots < s_n$), oder etwas anders geschrieben:

$$P(X_{s_i} - X_{s_{i-1}} \in G_i; i = 2, \dots, n) = \prod_{i=2}^n P(X_{s_i} - X_{s_{i-1}} \in G_i) \quad (56)$$

Was bringt diese Identität inhaltlich zum Ausdruck?

Definition Zwei Zufallsvariablen X und Y heißen *unabhängig*, wenn ihre gemeinsame Verteilung das Produkt einzelner Verteilungen ist, wenn also

$$P(X \in A, Y \in B) = P(X \in A)P(Y \in B)$$

für alle Mengen A, B gilt. Entsprechend definiert man die *Unabhängigkeit von n Zufallsvariablen*. Man sagt, ein stochastischer Prozeß besitze *unabhängige Zuwächse*, wenn für ihn die Formel (56) gilt.

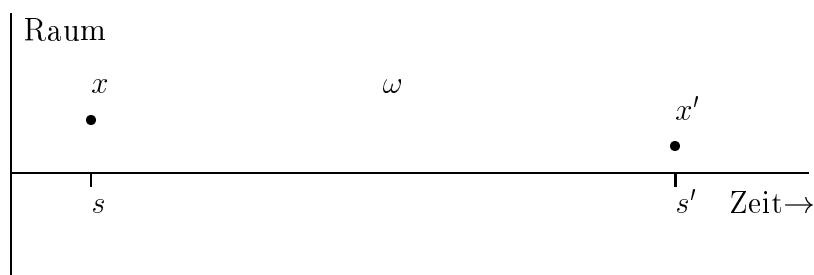
Fazit: Der Wiener-Prozeß ist ein homogener Gauß-Prozeß mit unabhängigen Zuwächsen.

3 Pfadintegrale in der Quantenmechanik

3.1 Das bedingte Wiener-Maß

Wir wollen nun nicht mehr einzelne zufällige Pfade, sondern *Mengen* solcher Pfade betrachten und ihnen ein Maß zuordnen, so daß einzelne Pfade das Gewicht Null bekommen, analog der Situation eines euklidischen Raumes, in dem einzelne Punkte das Volumen Null besitzen.

Für die Zwecke der Quantenmechanik erweist sich die folgende Mengenkonstruktion als nützlich. Es sei Ω die Menge aller stetigen Pfade $\omega : [s, s'] \rightarrow \mathbb{R}^3$ mit $\omega(s) = x$ und $\omega(s') = x'$ ($0 < s < s'$). In Worten: Anfangs- und Endpunkt der Pfade sind fest vorgegeben:



Wir setzen fest: Die Menge Ω besitzt das Maß

$$\mu(\Omega) = \int_{\Omega} d\mu(\omega) = K(x' - x, s' - s) \quad (57)$$

mit $K(x, s) = (2\pi s)^{-3/2} \exp(-(2s)^{-1}x^2)$. Welche andere Wahl wäre hier natürlicher? Das Ergebnis ist immer eine Zahl zwischen 0 und 1. Nun gehen wir daran, Teilmengen von Ω zu kennzeichnen und ihnen ein Maß zuzuordnen. Zu diesem Zweck unterteilen wir das Zeitintervall, indem wir n Zwischenzeiten wählen:

$$s < s_1 < \dots < s_n < s'$$

Für jede dieser Zeiten s_i wählen wir ein Fenster $A_i \subset \mathbb{R}^3$ und verlangen, daß alle Pfade diese Fenster passieren. Die so bestimmte Menge heiße Ω_A , wenn $A = A_1 \times \dots \times A_n$ gesetzt wird. Formal:

$$\Omega_A = \{\omega \in \Omega \mid \omega(s_i) \in A_i, i = 1, \dots, n\} \quad (58)$$

Jede solche Menge erhält kraft Definition das Maß $\mu(\Omega_A) = \int_{\Omega_A} d\mu(\omega) =$

$$\int_{A_n} d^3x_n \dots \int_{A_1} d^3x_1 K(x' - x_n, s' - s_n) \dots K(x_1 - x, s_1 - s) \quad (59)$$

Die rechte Seite zeigt eine recht enge Beziehung zur bedingten Wahrscheinlichkeit, wie sie im Wiener-Prozeß auftrat. Es gilt nämlich

$$P(\{X_{s_1}, \dots, X_{s_n}\} \in A \mid X_s = x, X_{s'} = x') = \frac{\mu(\Omega_A)}{\mu(\Omega)} \quad (60)$$

Variiert man A über alle cartesischen Produkte $A_1 \times \dots \times A_n$, so erhält man ein *erzeugendes System*¹⁵ von Teilmengen $\Omega_A \subset \Omega$. Das Maß μ läßt sich auf alle meßbaren Mengen fortsetzen. Es wird das **bedingte Wiener-Maß** genannt. Die Grundmenge Ω und das Maß μ hängen von x, x', s, s' ab. Will man diese Abhängigkeit betonen, so schreibt man

$$\Omega = \Omega_{x,s}^{x',s'} \quad \mu = \mu_{x,s}^{x',s'} \quad (61)$$

Mit Hilfe des Maßes μ definiert man das *Pfadintegral*

$$I(f) = \int_{\Omega} d\mu(\omega) f(\omega) = \int_{(x,s) \rightarrow (x',s')} d\mu(\omega) f(\omega) \quad (62)$$

für “geeignete” Funktionen $f : \Omega \rightarrow \mathbb{R}$. Eine solche Funktion ist etwa die charakteristische Funktion einer Menge Ω_A , wie wir sie oben betrachteten :

$$f_A(\omega) = \begin{cases} 1 & \omega \in \Omega_A \\ 0 & \text{sonst} \end{cases}$$

In diesem Fall ist das Pfadintegral sehr einfach zu berechnen,

$$\int d\mu(\omega) f_A(\omega) = \mu(\Omega_A) \quad , \quad (63)$$

weil wir hier nur die Definition des Maßes benutzten. Die Funktion f_A ist in der Tat sehr speziell. Man kann sie selbst wieder als ein Produkt von charakteristischen Funktionen schreiben:

$$f_A(\omega) = \prod_{i=1}^n \chi_{A_i}(\omega(s_i)) \quad (64)$$

mit

$$\chi_B(x) = \begin{cases} 1 & x \in B \\ 0 & \text{sonst} \end{cases} \quad (B \subset \mathbb{R}^3)$$

und erkennen, daß f_A nur von *endlichen vielen Koordinaten* des Pfades ω abhängt, nämlich den Positionen $\omega(s_1), \dots, \omega(s_n)$.

¹⁵Eine beliebige meßbare Menge entsteht durch (uneingeschränkte) Durchschnitte und abzählbare Vereinigungen solcher Basismengen.

Für eine allgemeine Funktion f ist es nahezu unmöglich, das Pfadintegral zu bestimmen, sei es vermöge einer expliziten Formel oder durch einen effektiven numerischen Algorithmus. Wenn jedoch f , wie in dem Beispiel, nur von endlich vielen Koordinaten des Pfades abhängt, reduziert sich das Pfadintegral immer auf ein endlichdimensionales Integral¹⁶. Diesen Vorgang wollen wir nun näher beschreiben. Wir fixieren die Zeitpunkte s_i , variieren aber die Mengen A_i in $A = A_1 \times \cdots \times A_n$. Durch endliche Superpositionen $g = \sum_A c_A f_A$ mit reellen Koeffizienten c_A entstehen stückweise konstante Funktionen von $\omega(s_1), \dots, \omega(s_n)$, und jede stückweise konstante Funktion von $3n$ Variablen kann so geschrieben werden. Aus der Linearität des Integrals folgt:

$$\begin{aligned}
\int d\mu g &= \sum_A c_A \mu(\Omega_A) \\
&= \sum_A c_A \int_{A_n} d^3x_n \cdots \int_{A_1} d^3x_1 K(x' - x_n, s' - s_n) \cdots K(x_1 - x, s_1 - s) \\
&= \int d^3x_n \cdots \int d^3x_1 \sum_A c_A \prod_{i=1}^n \chi_{A_i}(x_i) K(x' - x_n, s' - s_n) \cdots K(x_1 - x, s_1 - s) \\
&= \int d^3x_n \cdots \int d^3x_1 g(x_1, \dots, x_n) K(x' - x_n, s' - s_n) \cdots K(x_1 - x, s_1 - s)
\end{aligned}$$

Jede stetige Funktion f von $3n$ Variablen kann durch stückweise konstante Funktionen approximiert werden. Durch einen Grenzübergang gewinnen wir deshalb die folgende Aussage:

Ist die zu integrierende Funktion $f : \Omega \rightarrow \mathbb{R}$ so beschaffen, daß sie nur von endlich vielen Koordinaten des Pfades ω abhängt, und sind dies die Positionen $x_i = \omega(s_i) \in \mathbb{R}^3$ zu den Zeiten s_i , so gilt $\int d\mu f =$

$$\int d^3x_n \cdots \int d^3x_1 f(x_1, \dots, x_n) K(x' - x_n, s' - s_n) \cdots K(x_1 - x, s_1 - s) \quad (65)$$

unter der Annahme $s < s_1 < \dots < s_n < s'$.

Da n hier eine beliebig große Zahl sein kann, ist die Sprechweise gerechtfertigt, das Pfadintegral stelle eine Verallgemeinerung des gewöhnlichen n -dimensionalen Integrals dar, bei der $n = \infty$ ist.

¹⁶Die Dimension eines solchen Integrals kann unter Umständen so groß sein (z.B. 100), daß auch hier an eine Berechnung nicht zu denken ist.

3.2 Approximation durch äquidistante Zeiten

Genauso wie man ein gewöhnliches Integral als Limes einer Riemann-Summe von n Termen für $n \rightarrow \infty$ erklärt, gewinnt man das allgemeine Pfadintegral als Limes eines $3n$ -dimensionalen gewöhnlichen Integrals für $n \rightarrow \infty$. Genauso wie man sich die Berechnung der Riemann-Summe durch Wahl einer äquidistanten Unterteilung des Integrationsintervalls erleichtert, kann man die $3n$ -dimensionalen Integrale durch eine äquidistante Wahl der zeitlichen Stützpunkte s_1, \dots, s_n spezialisieren. Ein solches Approximationsverfahren soll *kanonisch* genannt werden. Wir setzen also

$$s_k = s + k\tau \quad , \quad k = 0, \dots, n \quad , \quad \tau = \frac{s' - s}{n + 1}$$

und garantieren so, daß der Zeitschritt τ gegen Null strebt, wenn n groß wird. Eine interessante Situation entsteht, wenn die zu integrierende Funktion selbst mittels eines Zeitintegrals definiert ist. Etwa so:

$$f(\omega) = \exp \left\{ - \int_s^{s'} dt V(\omega(t)) \right\} \quad (66)$$

Hier wäre es nämlich möglich, das Zeitintegral durch eine Riemann-Summe zu approximieren, um so zu Näherungsfunktionen f_n zu gelangen, die nur von endlich vielen Koordinaten des Pfades ω abhängen:

$$f_n(\omega) = \exp \left\{ - \sum_{k=0}^n \tau V(\omega(s_k)) \right\} \quad (67)$$

Auf diese Weise erhalten wir das Integral der Funktion f über alle Pfade $(x, s) \rightarrow (x', s')$:

$$\begin{aligned} \int d\mu f &= \lim_{n \rightarrow \infty} \int d\mu f_n \\ &= \lim_{n \rightarrow \infty} \int d^3x_n \cdots \int d^3x_1 K(x' - x_n, \tau) e^{-\tau V(x_n)} K(x_n - x_{n-1}, \tau) \\ &\quad \cdots e^{-\tau V(x_2)} K(x_2 - x_1, \tau) e^{-\tau V(x_1)} K(x_1 - x, \tau) e^{-\tau V(x)} \end{aligned}$$

Die Interpretation dieser Formel gestaltet sich sehr einfach, wenn wir zu dem Operatorkalkül zurückkehren. Es ist hierfür nur nötig, sich daran zu erinnern, daß $K(\cdot, \tau)$ der Integralkern des Operators $e^{\tau \Delta/2}$ war. Wenn wir dann noch den Multiplikationsoperator

$$[V\phi](x) = V(x)\phi(x) \quad (\phi \in L^2(\mathbb{R}^2)) \quad (68)$$

einführen und also $[e^{-\tau V} \phi](x) = e^{-\tau V(x)} \phi(x)$ gilt, so erkennen wir leicht, daß für jedes $n \geq 1$ der Operator

$$T_n = |e^{\tau \Delta/2} e^{-\tau V}|^{n+1} \quad (69)$$

den Integralkern

$$T_n(x', x) = \int_{(x,s) \rightarrow (x',s')} d\mu(\omega) f_n(\omega) \quad (70)$$

besitzt. Wenn wir jetzt noch glaubhaft machen können, daß der Operatorlimes $T = \lim T_n$ existiert und darüberhinaus auch noch

$$T = e^{-(s'-s)H} \quad H = -\frac{1}{2}\Delta + V \quad (71)$$

gilt, so wäre ein Zusammenhang mit einem quantenmechanischen Problem hergestellt, bei dem ein Teilchen sich in dem Potential $V(x)$ bewegt. Vorsicht ist geboten: nicht jedes Potential führt auf ein sinnvolles Pfadintegral. Durch geeignete Bedingungen muß erreicht werden, daß die Funktion $\exp(-V(x))$ nirgendwo im Raum zu stark anwächst. Dies ist auf jeden Fall gewährleistet, wenn das Potential von unten beschränkt ist: $V(x) > -c$. Notfalls muß das Potential regularisiert werden, bevor es in ein Pfadintegral eingesetzt wird.

3.3 Die Feynman-Kac-Formel

Das Problem, das sich uns stellt, kann allgemein so formuliert werden: Gegeben zwei Operatoren A und B , welchen Limes besitzt die Folge

$$|e^{A/n} e^{B/n}|^n \quad (72)$$

für $n \rightarrow \infty$? Kommutieren die Operatoren miteinander, so ist die Folge unabhängig von n , nämlich gleich e^{A+B} , und dies wäre zugleich auch ihr Limes. Nun kann man in der Tat unter sehr allgemeinen Voraussetzungen die Gültigkeit der *Trotter-Produktformel*

$$e^{A+B} = \lim_{n \rightarrow \infty} |e^{A/n} e^{B/n}|^n \quad (73)$$

beweisen, ohne daß $[A, B] = 0$ erfüllt sein muß.

Der einfachste Beweis benutzt die Voraussetzung, daß sowohl A als auch B beschränkte Operatoren sind:

$$\begin{aligned} \|A\| &= \sup_{\|\phi\|=1} \|A\phi\| < \infty \\ \|B\| &= \sup_{\|\phi\|=1} \|B\phi\| < \infty \end{aligned}$$

Auf diesen Beweis wollen wir näher eingehen. Zur Abkürzung setzen wir

$$C = e^{A/n+B/n} \quad D = e^{A/n} e^{B/n}$$

Dann gilt

$$\begin{aligned} \|C\| &\leq \exp\{\tfrac{1}{n}\|A+B\|\} \leq \exp\{\tfrac{1}{n}(\|A\| + \|B\|)\} \\ \|D\| &\leq \|e^{A/n}\| \|e^{B/n}\| \leq \exp\{\tfrac{1}{n}\|A\|\} \exp\{\tfrac{1}{n}\|B\|\} = \exp\{\tfrac{1}{n}(\|A\| + \|B\|)\} \end{aligned}$$

Die Trotter-Formel ist bewiesen, wenn gezeigt ist, daß $\|C^n - D^n\|$ für wachsendes n gegen Null strebt. Dies beweisen wir, indem wir zunächst schreiben

$$C^n - D^n = \sum_{k=1}^n C^{k-1}(C - D)D^{n-k} \quad (74)$$

und dann diese Summe termweise abschätzen:

$$\begin{aligned} \|C^n - D^n\| &\leq \sum_{k=1}^n \|C\|^{k-1} \|C - D\| \|D\|^{n-k} \\ &\leq n \|C - D\| \exp\left\{\frac{n-1}{n}(\|A\| + \|B\|)\right\} \\ &\leq n \|C - D\| \exp\{(\|A\| + \|B\|)\} \end{aligned}$$

Nun besitzen C und D konvergente Entwicklungen nach $\frac{1}{n}$, so daß wir die Darstellung besitzen:

$$C - D = \frac{1}{n^2} R \quad R = \frac{1}{2}[B, A] + O\left(\frac{1}{n}\right) \quad (75)$$

Da R ein beschränkter Operator ist, gilt $\|C - D\| = O(n^{-2})$ und somit $\|C^n - D^n\| = O(n^{-1})$, was den Beweis vollendet.

Jetzt sei $A = (s' - s)\Delta/2$ und $B = -(s' - s)V$, also $A + B = -(s' - s)H$ unter den Bezeichnungen des letzten Abschnittes. Ebenso gilt

$$T_{n-1} = (e^{A/n} e^{B/n})^n \quad (76)$$

für den dort eingeführten Operator T_n . Zwar sind A und B in diesem Fall nicht beschränkt, die Trotter-Formel gilt dennoch unter der Voraussetzung $V(x) > -c$, wie man mit etwas mehr Aufwand beweisen kann, und somit erhalten wir

$$T = \lim_{n \rightarrow \infty} T_n = e^{-(s'-s)H} \quad (s' > s) \quad (77)$$

Nun haben wir schon gesehen, daß der Integralkern des Operators T sich als ein Pfadintegral darstellen läßt, und gelangen so zu dem Schluß:

Theorem Für ein von unten beschränktes Potential $V(x)$ und den Hamilton-Operator $H = -\frac{1}{2}\Delta + V$ besitzt der Operator $e^{-(s'-s)H}$ mit $s' > s$ den Integralkern

$$e^{-(s'-s)H}(x', x) = \int_{(x,s) \rightarrow (x',s')} d\mu(\omega) \exp \left\{ - \int_s^{s'} dt V(\omega(t)) \right\} \quad (78)$$

(Feynman-Kac-Formel). Das Pfadintegral erstreckt sich über alle Brownschen Pfade von (x, s) nach (x', s') .

Was hier als Integralkern bezeichnet wurde, nennen manche Autoren die “Übergangsamplitude” und schreiben hierfür suggestiv

$$\langle x', s' | x, s \rangle := e^{-(s'-s)H}(x', x) \quad (79)$$

Gewöhnliche eindimensionale Integrale können in vielen Fällen ausgewertet werden, ohne daß man zu einem numerischen Verfahren greifen muß. Davon zeugen die umfangreichen Integraltafeln. Mehrdimensionale Integrale sind nur selten in geschlossener Form angebbbar; hier ist oft die numerische Integration das einzige methodische Werkzeug, um zu konkreten Zahlen zu gelangen. Explizite Ausdrücke für Pfadintegrale sind eine Rarität, und schlimmer noch, auch die numerischen Standardverfahren versagen. Ein geschlossen angebbares Pfadintegral erhält man für den Fall des harmonischen Oszillators in d Dimensionen (Mehlersche Formel). Die allgemein übliche Herleitung macht jedoch *nicht* von dem Pfadintegral Gebrauch, sondern benutzt die Operorteknik¹⁷. Für $d = 3$ und $V(x) = \frac{1}{2}k^2x^2$ werden wir im Abschnitt 2.4 die Mehlersche Formel mit der Pfadintegralmethode herleiten. Dort erhalten wir, die Abkürzung $\nu = k(s' - s)$ benutzend:

$$\begin{aligned} & \int_{(x,s) \rightarrow (x',s')} d\mu(\omega) \exp \left\{ -\frac{1}{2}k^2 \int_s^{s'} dt \omega(t)^2 \right\} \\ &= \left[\frac{k}{2\pi \sinh \nu} \right]^{3/2} \exp \left\{ -\frac{k(x^2 + x'^2)}{2 \tanh \nu} + \frac{kxx'}{\sinh \nu} \right\} \quad (80) \end{aligned}$$

Die Formel läßt erkennen, daß – wie zu erwarten war – die linke Seite als Funktion von ν eine analytische Fortsetzung in die Halbebene $\Re \nu > 0$ gestattet. Singularitäten treffen wir entlang der imaginären Achse.

¹⁷Die Methode ist in Glimm/Jaffe *Quantum Physics*, Ch.1.5 dargestellt.

Für manche Fragen ist die analytische Fortsetzung zu imaginären Zeiten nicht erforderlich, ja sogar hinderlich. Ein Beispiel: der Hamilton-Operator H habe einen (eindeutigen normierten) Grundzustand $\phi_0(x)$ mit der Energie E_0 . Das übrige Spektrum beginne bei $E_1 > E_0$. Wir interessieren uns für die Größe von E_0 und die Gestalt der Wellenfunktion $\phi_0(x)$. Wir gewinnen beides durch das Studium des asymptotischen Verhaltens eines Pfadintegrals für große reelle Zeiten:

$$\langle x', s' | x, s \rangle = \phi_0(x') \bar{\phi}_0(x) e^{-(s'-s)E_0} + O(e^{-(s'-s)E_1}) \quad s' - s \rightarrow \infty \quad (81)$$

Eine entsprechende asymptotische Darstellung existiert nicht bei Benutzung imaginärer (d.h. physikalischer) Zeiten.

Die Definition des Pfadintegrals garantiert, daß die Übergangsamplitude eine nichtnegative Größe ist. Sie ist sogar strikt positiv in den Bereichen, wo das Potential von oben beschränkt ist; $+\infty$ ist ja ein zulässiger Wert für das Potential. Also gilt insbesondere

$$\phi_0(x') \bar{\phi}_0(x) \geq 0 \quad (82)$$

für alle x, x' . In (82) können wir das Zeichen \geq durch $>$ ersetzen in solchen Punkten, in denen das Potential nicht den Wert $+\infty$ annimmt. Dies alles sagt, daß nach Korrektur durch eine konstante Phase sogar $\phi_0(x) \geq 0$ gilt, genauer:

$$\phi_0(x) > 0 \quad \text{falls} \quad V(x) < +\infty \quad (83)$$

$$\phi_0(x) = 0 \quad \text{falls} \quad V(x) = +\infty \quad (84)$$

In Worten:

Der Grundzustand wird durch eine reelle nichtnegative Wellenfunktion repräsentiert. Sie kann also auch keine "Knoten" besitzen.

Die genannten Tatsachen sind leicht anhand der Mehlerschen Formel für den harmonischen Oszillator überprüfbar. Aus (80) folgt für $\nu \rightarrow \infty$

$$\langle x', s' | x, s \rangle \approx \left[\frac{k}{\pi} e^{-\nu} \right]^{3/2} \exp\left\{ -\frac{1}{2} k x'^2 - \frac{1}{2} k x^2 \right\} \quad (85)$$

($\nu = k(s' - s)$), so daß erwartungsgemäß Grundzustand und Grundenergie die Form haben:

$$\phi_0(x) = (k/\pi)^{3/4} e^{-kx^2/2} \quad E_0 = \frac{3}{2}k \quad (86)$$

Wenn es so schwer ist Pfadintegrale zu berechnen, welche Vorteile und welchen wissenschaftlichen Wert hat dann die Darstellung quantenmechanischer Größen durch solche Integrale? Der Hauptvorteil liegt wohl darin, daß Integrale sich besser approximieren, umformen und abschätzen lassen als Größen, die nur durch einen Existenzbeweis und sonst nichts gegeben sind. Nicht zuletzt eröffnet die Darstellung durch Pfadintegrale die Möglichkeit, neuartige numerische Verfahren (Monte-Carlo-Methoden) zu ihrer Auswertung einzusetzen. Die mathematische Analyse des Konvergenzverhaltens dieser Methoden steckt noch in den Kinderschuhen. Auf einer Großrechenanlage können solche Verfahren jedoch sehr effizient sein, und die Leistungsfähigkeit wird sich in naher Zukunft beträchtlich steigern lassen, so daß es bald Bibliotheksprogramme für quantenmechanische Rechnungen auf der Basis der Brownschen Bewegung geben wird.

Wir haben die Feynman-Kac-Formel nur für den Fall eines einzelnen Teilchens in einem äußeren Potential diskutiert. Probleme von n Teilchen mit den Massen m_1, \dots, m_n unter dem Einfluß von Relativkräften und äußeren Kräften lassen sich mit der gleichen Methode behandeln. In einem solchen Fall geht man zweckmäßig von einem, dem Problem angepaßten anisotropen $3n$ -dimensionalen Wiener-Prozeß aus, der zur Diffusionsgleichung

$$\frac{\partial}{\partial s} f(x, s) = \sum_{k=1}^n \frac{1}{2m_k} \Delta_k f(x, s) \quad (87)$$

gehört. Hier ist es sinnvoll, den Multivektor $x = \{x_1, \dots, x_n\}^T \in \mathbb{R}^{3n}$ und eine Massenmatrix M durch

$$x^T M x = \sum_{k=1}^n m_k x_k^2$$

einzuführen. Dem System ist ein einziges Potential $V(x)$ und ein fiktives Brownsches Teilchen in $3n$ Raumdimensionen zugeordnet, dessen Propagator die folgende Gauß-Funktion ist:

$$K_M(x, s) = \left[\det \left(\frac{M}{2\pi s} \right) \right]^{\frac{1}{2}} \exp \left\{ -\frac{x^T M x}{2s} \right\} \quad (88)$$

In unseren früheren Betrachtungen war die Diffusionskonstante D eine einzige Zahl; wir konnten sie zu $D = \frac{1}{2}$ normieren. Angesichts eines Problems von n Teilchen erscheint D durch die Matrix $\frac{1}{2}M^{-1}$ ersetzt, und wir haben es mit n Diffusionskonstanten $(2m_k)^{-1}$ zu tun. An der äußeren Form der Feynman-Kac-Formel ändert sich jedoch überhaupt nichts.

3.4 Zwei Anwendungen

Die Nützlichkeit der Feynman-Kac-Formel soll an Beispielen demonstriert werden. Zuerst zeigen wir, wie der Operatorformalismus der Quantenmechanik in der Lage ist, bestimmte Fragen, die innerhalb der Theorie der Brownschen Bewegung selbst entstehen, definitiv zu beantworten. Ein zweites Beispiel soll dann erläutern, wie umgekehrt aus dem Pfadintegral eine interessante Ungleichung für die Quantenmechanik gewonnen werden kann.

3.5 Die Brownsche Röhre

Ein Brownsches Teilchen (Dimension $d = 3$, Diffusionskonstante $D = \frac{1}{2}$) starte zur Zeit s im Inneren einer Kugel $|x| < a$. Wir möchten die Wahrscheinlichkeit bestimmen, mit der es die Raumzeit-Röhre $|x| \leq a$, $s < t < s'$ passiert. Dies entspricht der Diffusion eines Teilchens in einem Gas, einer Flüssigkeit oder einem Festkörper, wenn das Teilchen von der umgebenden kugelförmigen Wand absorbiert wird, sobald es in diese einzudringen versucht. Mit Ω bezeichnen wir wie früher die Menge aller Pfade ω mit $\omega(s) = x$ und $\omega(s') = x'$ und mit μ das bedingte Wiener-Maß. Wir sind zunächst aufgefordert, das Maß $\mu(\Omega_a)$ der Menge

$$\Omega_a = \{\omega \in \Omega \mid |\omega(t)| \leq a, s \leq t \leq s'\} \quad (89)$$

zu bestimmen und dann das Ergebnis über die möglichen Werte von x' zu integrieren. In der Menge Ω_a sind offenbar *unendlich* viele Koordinaten des Pfades ω von der Beschränkung $\leq a$ betroffen: wir haben es deshalb in diesem Beispiel mit der Darstellung von $\mu(\Omega_a)$ durch ein Pfadintegral zu tun, das sich nicht durch ein endlichdimensionales gewöhnliches Integral repräsentieren läßt. Wir lösen dieses Problem durch Analyse des zugeordneten quantenmechanischen Problems eines Teilchens der Masse $\frac{1}{2}$ in dem Potential

$$V(x) = \begin{cases} 0 & |x| \leq a \\ +\infty & |x| > a \end{cases} \quad (90)$$

Denn mit dieser Festsetzung gilt

$$\exp \left\{ - \int_s^{s'} dt V(\omega(t)) \right\} = \begin{cases} 1 & \omega \in \Omega_a \\ 0 & \text{sonst} \end{cases} \quad (91)$$

und wir können schreiben:

$$\begin{aligned} \mu(\Omega_a) &= \int_{(x,s) \rightarrow (x',s')} d\mu(\omega) \exp \left\{ - \int_s^{s'} dt V(\omega(t)) \right\} \\ &= e^{-(s'-s)H(x',x)} \end{aligned}$$

setzen. Der Hamilton-Operator $H = -\frac{1}{2}\Delta + V$ besitzt ein rein diskretes Spektrum bestehend aus den Energiewerten $E_{n\ell} = \frac{1}{2}\lambda_{n\ell}^2 a^{-2}$. Die zugehörigen normierten Eigenfunktionen sind

$$\phi_{n\ell m}(x) = \begin{cases} c_{n\ell}^{-1/2} j_\ell(\lambda_{n\ell} r/a) Y_{\ell m}(\theta, \phi) & |x| < a \\ 0 & |x| \geq a \end{cases} \quad (92)$$

$$c_{n\ell} = \int_0^a r^2 dr j_\ell(\lambda_{n\ell} r/a)^2 \quad (93)$$

($n = 1, 2, \dots$; $\ell = 0, 1, \dots$; $m = -\ell \leq m \leq \ell$; r, θ und ϕ sind die Polarkoordinaten von x). Die *sphärischen Bessel-Funktionen* $j_\ell(z)$ sind oszillierende Funktionen von $z > 0$. Ihre Nullstellen haben wir mit $\lambda_{n\ell}$ bezeichnet:

$$j_\ell(\lambda_{n\ell}) = 0 \quad 0 < \lambda_{1\ell} < \lambda_{2\ell} < \dots \quad (94)$$

Wir setzen $t = s' - s$ und gewinnen so die Darstellung

$$e^{-tH}(x', x) = \sum_{n\ell m} \phi_{n\ell m}(x') \bar{\phi}_{n\ell m}(x) \exp\{-t(2a^2)^{-1}\lambda_{n\ell}^2\}$$

Die nachfolgende Integration über x' projiziert den $\ell = 0$ -Anteil heraus:

$$\int d^3x' e^{-tH}(x', x) = \sum_{n=1}^{\infty} c_{n0}^{-1} j_0(\lambda_{n0} r/a) I_n \exp\{-t(2a^2)^{-1}\lambda_{n0}^2\} \quad (r < a)$$

$$I_n = \int_0^a r^2 dr j_0(\lambda_{n0} r/a)$$

Nun gilt

$$j_0(z) = \frac{\sin z}{z} \quad \lambda_{n0} = n\pi$$

und somit

$$c_{n0} = \frac{a^2}{n^2 \pi^2} \int_0^a dr [\sin(n\pi r/a)]^2 = \frac{a^3}{2n^2 \pi^2}$$

$$I_n = \frac{a}{n\pi} \int_0^a r dr \sin(n\pi r/a) = (-1)^{n+1} \frac{a^3}{n^2 \pi^2}$$

Das Resultat ist die Formel

$$\int d^3x' e^{-tH}(x', x) = \sum_{n=1}^{\infty} 2(-1)^{n+1} \frac{\sin(n\pi r/a)}{n\pi r/a} \exp\left\{-t \frac{n^2 \pi^2}{2a^2}\right\} \quad (r < a)$$

$$=: P_a(r, t)$$

Sie enthält eine Variante des Jacobischen Thetafunktion. Dieses Ergebnis ist zu vergleichen mit der unbehinderten Irrfahrt:

$$P_\infty(r, t) = \int d^3x' e^{-tH_0}(x', x) = \int d^3x' K(x' - x, t) = 1$$

Folglich ist $P_a(r, t)$ die Wahrscheinlichkeit, daß das Brownsche Teilchen nach einer Zeitspanne t noch nicht absorbiert wurde. Startet das Teilchen am Rand ($r = a$), so hat es überhaupt keine Überlebenschance: $P_a(a, t) = 0$. Für $r = 0$ erreicht die Wahrscheinlichkeit bei festem t ihr Maximum. In jedem Fall klingt die Wahrscheinlichkeit exponentiell mit der Zeit ab, nämlich wie $e^{-t/\tau}$, wobei $\tau = 2(a/\pi)^2 = 1/E_{10}$ die Lebensdauer darstellt. Für eine allgemeine Diffusionskonstante D erhalten wir die Lebensdauer

$$\tau = \frac{a^2}{\pi^2 D} \quad (95)$$

Die Diskussion läßt zugleich den allgemeinen Sachverhalt erkennen:

Die Lebensdauer eines Brownschen Teilchens für die Bewegung in einem Gebiet mit absorbierenden Rändern ist die inverse Energie des Grundzustandes eines zugeordneten quantenmechanischen Problems.

Die Lösung eines dynamischen Problems (Lebensdauer) ergibt sich somit aus der Lösung eines statischen Problems (Energie).

3.6 Die Golden-Thompson-Symanzik-Schranke

Wir benötigen eine kurze Vorbetrachtung rein mathematischer Art über konvexe Funktionen.

Eine reelle Funktion $f(u)$ mit $u \in I \subset \mathbb{R}$ heißt *konvex* in einem Intervall I , wenn gilt:

$$f(\alpha u + (1 - \alpha)u') \leq \alpha f(u) + (1 - \alpha)f(u')$$

für alle $u, u' \in I$ und $0 \leq \alpha \leq 1$. Aus dieser einfachen Eigenschaft folgt durch Induktion

$$f\left(\sum \alpha_i u_i\right) \leq \sum \alpha_i f(u_i)$$

für alle $u_i \in I$ und $0 \leq \alpha_i \leq 1$, so daß $\sum \alpha_i = 1$. Indem wir von Summen zu Integralen übergehen, erhalten wir die *Ungleichung von Jensen*

$$f\left(\frac{1}{s} \int_0^s dt g(t)\right) \leq \frac{1}{s} \int_0^s dt f(g(t))$$

gültig für jede integrierbare Funktion $g : \mathbb{R}_+ \rightarrow I$ und alle $s > 0$.

Durch eine einfache Translation aller Pfade $\omega : (x, 0) \rightarrow (x + a, s)$ um den Vektor $-x$ ist es möglich, die Feynman-Kac-Formel so zu schreiben, daß man darin genau über diejenigen Pfade integriert, die im Ursprung beginnen. Hierdurch tritt eine gewisse Vereinfachung ein:

$$e^{-sH}(x + a, x) = \int_{(0,0) \rightarrow (a,s)} d\mu(\omega) \exp\left\{-\int_0^s dt V(x + \omega(t))\right\} \quad (96)$$

Um die Ungleichung von Jensen anzuwenden, setzen wir $f(u) = e^{-u}$ und $g(t) = sV(x + \omega(t))$. Also gilt

$$\exp\left\{-\int_0^s dt V(x + \omega(t))\right\} \leq \frac{1}{s} \int_0^s dt e^{-sV(x + \omega(t))} \quad (97)$$

Nun wollen wir annehmen, daß H ein rein diskretes Spektrum besitzt mit Eigenwerten E_n , $n = 0, 1, 2, \dots$, die nach $+\infty$ streben. Eine Größe, die uns eine komplette Auskunft über alle Eigenwerte gibt (gewissermaßen die erzeugende Funktion dieser Eigenwerte), ist die Spur des Operators e^{-sH} :

$$\text{Spur } e^{-sH} = \sum_{n=0}^{\infty} e^{-sE_n}$$

Zugleich gilt $\text{Spur } e^{-sH} = \int d^3x e^{-sH}(x, x)$. Dieses Integral schätzen wir durch die Jensen-Ungleichung nach oben ab und ändern die Reihenfolge der entstehenden Integrale:

$$\text{Spur } e^{-sH} \leq \int d^3x \int_{(0,0) \rightarrow (0,s)} d\mu(\omega) \frac{1}{s} \int_0^s dt e^{-sV(x + \omega(t))}$$

$$\begin{aligned}
&= \int_{(0,0) \rightarrow (0,s)} d\mu(\omega) \frac{1}{s} \int_0^s dt \int d^3x e^{-sV(x+\omega(t))} \\
&= \int_{(0,0) \rightarrow (0,s)} d\mu(\omega) \frac{1}{s} \int_0^s dt \int d^3x e^{-sV(x)} \\
&= K(0, s) \int d^3x e^{-sV(x)}
\end{aligned}$$

mit dem Ergebnis

$$\text{Spur } e^{-sH} \leq (2\pi s)^{-3/2} \int d^3x e^{-sV(x)} \quad (s > 0) \quad (98)$$

(*Golden-Thompson-Symanzik-Ungleichung*). Wir testen die Güte dieser Schranke an dem Beispiel des harmonischen Oszillators $H = -\frac{1}{2}\Delta + \frac{1}{2}k^2x^2$. Die Eigenwerte sind $E(n_1, n_2, n_3) = (n_1 + n_2 + n_3 + 3/2)k$ ($n_i \geq 0$), so daß

$$\text{Spur } e^{-sH} = \left\{ \sum_{n=0}^{\infty} e^{-(n+1/2)sk} \right\}^3 = [2 \sinh(sk/2)]^{-3}$$

Als obere Schranke erhalten wir gemäß (98):

$$(2\pi s)^{-3/2} \int d^3x e^{-sk^2x^2/2} = (sk)^{-3}$$

Wie man sieht, beruht die GTS-Ungleichung in der speziellen Situation des harmonischen Oszillators auf der sehr einfachen und offensichtlichen Ungleichung $u \leq \sinh u$ für $u = sk/2$. Die Schranke wird umso schlechter, je größer s ist.

Indem man $(2\pi s)^{-3/2} = (2\pi)^{-3} \int d^3p \exp\{-\frac{1}{2}sp^2\}$ schreibt und auf diese Weise die Impulsvariable $p \in \mathbb{R}^3$ einführt, kann man der GTS-Ungleichung (98) eine überraschende neue Form geben:

$$\text{Spur } e^{-sH} \leq (2\pi)^{-3} \int d^3pd^3q e^{-s\hat{H}(p,q)} \quad (99)$$

mit der klassischen Hamilton-Funktion $\hat{H}(p, q) = \frac{1}{2}p^2 + V(q)$ und dem Liouville-Maß d^3pd^3q . Durch Wiedereinführung von \hbar und $h = 2\pi\hbar$ entsteht dann

$$\text{Spur } e^{-sH} \leq h^{-3} \int d^3pd^3q e^{-s\hat{H}(p,q)} \quad (100)$$

(s besitzt die Dimension (*Energie*) $^{-1}$). Das dimensionslose Maß $h^{-3}d^3pd^3q$ mißt das Phasenraumvolumen eines klassischen Teilchens in Einheiten von h^3 .

Die vorstehenden Betrachtungen galten einem einzelnen Teilchen aus Gründen der Einfachheit. Angesichts eines Hamilton-Operators H für n Teilchen mit den Massen m_i und dem Potential $V(x)$ mit $x = \{x_1, \dots, x_n\} \in \mathbb{R}^{3n}$ benutzen wir die Massenmatrix M , wie auf Seite 24 eingeführt, und den allgemeinen Propagator $K_M(x, s)$ für ein Brownsches Teilchen in $3n$ Dimensionen. Ist e^{-sH} ein Spurklasse-Operator, so gilt mit dem gleichen Argument wie oben

$$\text{Spur } e^{-sH} \leq K_M(0, s) \int dx e^{-sV(x)} \quad (101)$$

mit $dx = d^3x_1 \cdots d^3x_n$. In einer mehr expliziten Schreibweise:

$$\text{Spur } e^{-sH} \leq \left[\det \left(\frac{M}{2\pi s} \right) \right]^{\frac{1}{2}} \int dx e^{-sV(x)} \quad (102)$$

(verallgemeinerte GTS-Ungleichung). Auch in der allgemeinen Situation können wir die Determinante durch ein Gauß-Integral ersetzen, um so die kinetische Energie in Erscheinung treten zu lassen, die sodann durch das Potential zur klassischen Hamilton-Funktion ergänzt wird:

$$\text{Spur } e^{-sH} \leq h^{-3n} \int dpdq e^{-s\hat{H}(p,q)} \quad (103)$$

$$\begin{aligned} dpdq &= \prod_{i=1}^n d^3p_i d^3q_i \\ \hat{H}(p, q) &= \sum_{i=1}^n \frac{p_i^2}{2m_i} + V(q_1, \dots, q_n) \end{aligned} \quad (104)$$

Vorsicht ist geboten, falls es sich hierbei um n identische Teilchen handelt. Denn die Spur bezieht sich immer auf den *Hilbertraum aller Zustände*, ohne Rücksicht auf Einschränkungen, die uns der Bose- oder Fermi-Charakter der Teilchen auferlegt. Bezeichnen wir mit $\text{Spur}_{\pm} e^{-sH}$ die Spur bezüglich des Unterraumes aller symmetrischen (+) bzw. antisymmetrischen (-) Zustände, so folgt aus der Invarianz von H unter Permutationen der Teilchenvariablen

$$\text{Spur}_{\pm} e^{-sH} \leq \text{Spur } e^{-sH} \quad (105)$$

und somit

$$\text{Spur}_{\pm} e^{-\beta H} \leq \frac{1}{h^{3n}} \int dpdq e^{-\beta\hat{H}(p,q)} =: \hat{Z}_n(\beta) \quad (106)$$

Hier haben wir s durch die Variable $\beta = (k_B T)^{-1}$ ersetzt, um auf mögliche Anwendungen in der statistischen Mechanik hinzuweisen, bei denen T die Rolle der Temperatur übernimmt. Das W-Maß

$$d\sigma_n^{\beta}(p, q) = \hat{Z}_n^{-1} h^{-3n} dpdq e^{-\beta\hat{H}(p,q)}$$

definiert einen Zustand des klassischen Vielkörpersystems aus n identischen Teilchen, den man das *kanonische Ensemble* nennt. Die Normierungskonstante $\hat{Z}_n(\beta)$ ist als die klassische *Zustandssumme* (engl. *partition function*) bekannt. Man definiert auch quantenmechanische Zustandssummen:

$$Z_{n,\pm}(\beta) = \text{Spur}_{\pm} e^{-\beta H} \quad (107)$$

Die Ungleichung (106) vergleicht also Zustandssummen miteinander. Bekanntlich sind Zustandssummen ein geeignetes Hilfsmittel zur Konstruktion thermodynamischer Funktionen (alle Konstruktionen, die auf der Zustandssumme basieren, machen keinen Unterschied zwischen Bose-, Fermi- und klassischen Systemen). Wir definieren die freie Energie F_n und die freie Energie pro Teilchen, f , (auch *Helmholtz-Energie* genannt) durch

$$\begin{aligned} e^{-\beta \hat{F}_n(\beta)} &= \hat{Z}_n(\beta) & \hat{f} &= \lim_{n \rightarrow \infty} n^{-1} \hat{F}_n(\beta) \\ e^{-\beta F_{n,\pm}(\beta)} &= Z_{n,\pm}(\beta) & f_{\pm} &= \lim_{n \rightarrow \infty} n^{-1} F_{n,\pm}(\beta) \end{aligned}$$

und erhalten die Ungleichung $f_{\pm}(\beta) \geq \hat{f}(\beta)$ als Folge von (106). Eine andere fundamentale thermodynamische Funktion ist die *Entropie pro Teilchen* $s(E)$ in Abhängigkeit von der Energie E . Sie ist in allen Situationen als die Legendre-Transformierte der Funktion $\beta f(\beta)$ definierbar:

$$\hat{s}(E) = \sup_{\beta} \{ \beta E - \beta \hat{f}(\beta) \} \quad (108)$$

$$s_{\pm}(E) = \sup_{\beta} \{ \beta E - \beta f_{\pm}(\beta) \} \quad (109)$$

Aus der Ungleichung für die Helmholtz-Energien folgt schließlich $s_{\pm}(E) \leq \hat{s}(E)$:

Sowohl für ein Bose- als auch ein Fermi-Gas wird die quantenmechanische Entropie durch die klassische Entropie bei gleicher Energie majorisiert.

Über die Natur der Wechselwirkung haben wir nahezu nichts annehmen müssen. Alle Abschätzungen durch die klassischen Größen werden umso schlechter, je niedriger die Temperatur T bzw. die Energie E ist. In der Nähe des absoluten Nullpunktes spielen Quanteneffekte die größte Rolle.

3.7 Zur statistischen Mechanik klassischer Spinsysteme

Unser Ziel in diesem Abschnitt wird sein, die Beziehung der Feynman-Kac-Formel zur statistischen Mechanik aufzuzeigen. Hierbei kommen klassische ferromagnetische Spinsysteme auf einem eindimensionalen Gitter in das Blickfeld. Der ‘‘Spin’’ jedoch erweist sich als eine recht ungewöhnliche Zustandsvariable und trägt diesen Namen nur aus Gründen der Analogie zu entsprechenden Modellen der Festkörperphysik. Die hier zu diskutierenden Gitter sind eindimensional, weil nur die Zeitachse in ein solches Gitter verwandelt wird.

Ausgangspunkt ist eine Aufteilung des Zeitintervalls $[s, s']$ in $n+1$ gleiche Teilstücke der Länge τ , wie im Abschnitt 2.2.1 besprochen: $s' - s = (n+1)\tau$. Unser Modell soll ein N -Teilchensystem mit der Massenmatrix M und dem Potential V sein. Wir setzen $\xi = \{x_1, \dots, x_N\}^T \in \mathbb{R}^{3N}$ und benutzen Pfade eines fiktiven Brownschen Teilchens in $3N$ Dimensionen mit dem Propagator

$$K_M(\xi, s) = \left[\det \left(\frac{M}{2\pi s} \right) \right]^{\frac{1}{2}} \exp \left\{ -\frac{\xi^T M \xi}{2s} \right\} \quad , \quad (110)$$

so daß für die Übergangsamplitude gilt:

$$\langle \xi', s' | \xi, s \rangle = \lim_{n \rightarrow \infty} \int d\xi_n \cdots \int d\xi_1 \prod_{j=0}^n K_M(\xi_{j+1} - \xi_j, \tau) e^{-\tau V(\xi_j)} \quad (111)$$

mit den **Randbedingungen**

$$\xi_0 = \xi, \quad \xi_{n+1} = \xi' \quad (112)$$

Ohne Potential erhalten wir selbstverständlich

$$\langle \xi', s' | \xi, s \rangle = K_M(\xi' - \xi, s' - s) \quad (113)$$

Die Grundidee ist, die in (111) enthaltene Vorschrift $n \rightarrow \infty$ als den *thermodynamischen Limes* (=Übergang zu einem unendlich großen Volumen) eines Spingitters aufzufassen, bestehend aus den ‘‘Gitterpunkten’’ $i = 0, 1, 2, \dots, n+1$ und besetzt mit den ‘‘Spinvariablen’’ $\xi_i \in \mathbb{R}^{3N}$, wobei die Randspins ξ_0 und ξ_{n+1} auf feste Werte gesetzt sind. Das $3nN$ -dimensionale Integral in (111) interpretieren wir als ‘‘Zustandssumme’’ des endlich ausgedehnten Systems. Das Konstruktionsprinzip wird klarer, wenn wir (111) anders schreiben:

$$\langle \xi', s' | \xi, s \rangle = \lim_{n \rightarrow \infty} \int e^{-I_n(\xi_1, \dots, \xi_n)} \prod_{i=1}^n \left[\det \left| \frac{M}{2\pi\tau} \right| \right]^{1/2} d\xi_i \quad (114)$$

mit

$$I_n(\xi_1, \dots, \xi_n) = \sum_{i=0}^n \tau \left\{ \frac{1}{2} v_i^T M v_i + V(\xi_i) \right\} \quad v_i = \frac{\xi_{i+1} - \xi_i}{\tau} \quad (115)$$

Durch die Schreibweise ist bereits angedeutet, daß wir v_i als eine zeitlich diskrete Version der *Geschwindigkeit* des Brownschen Teilchens zum Zeitpunkt $s+i\tau$ auffassen, dem wir darüberhinaus die kinetische Energie $\frac{1}{2}v_i^T M v_i$ zuordnen. Im Limes $n \rightarrow \infty$ strebt der Zeitschritt τ gegen Null. In einem formalen Sinne strebt deshalb I_n gegen das Zeitintegral der klassischen Energie unseres Ausgangssystems,

$$I(\omega) = \lim_{n \rightarrow \infty} I_n = \int_s^{s'} dt \left\{ \frac{1}{2} \dot{\omega}(t)^T M \dot{\omega}(t) + V(\omega(t)) \right\} \quad , \quad (116)$$

und $I(\omega)$ ließe sich als die *klassische Wirkung entlang des Pfades* ω interpretieren. Es ist uns jedoch verwehrt, den Limes $n \rightarrow \infty$ an I_n selbst auszuführen, weil ein typischer Pfad der Brownschen Bewegung keine Ableitung $\dot{\omega}$ besitzt. Zudem besitzt das Maß

$$\prod_{i=1}^n \left[\det \left| \frac{M}{2\pi\tau} \right| \right]^{1/2} d\xi_i$$

keinen Limes¹⁸ für $n \rightarrow \infty$. Es ist also wesentlich sicherer, anstelle des Wirkungsintegrals eine *Wirkungssumme* E_n zu definieren, die in jedem Fall wohldefiniert ist. Da wir dann aber genötigt sind, einen festen Zeitschritt (hier =1) zu wählen, erweist es sich als notwendig, eine variable Kopplungskonstante λ einzuführen:

$$E_n(\lambda) = \sum_{i=0}^{n+1} \lambda V(\xi_i) + \sum_{i=0}^n \frac{1}{2} (\xi_{i+1} - \xi_i)^T M (\xi_{i+1} - \xi_i) \quad , \quad (117)$$

Indem wir nämlich

$$\beta_n^{-1} = \lambda_n^{1/2} = \tau = \frac{s' - s}{n + 1} \quad , \quad (118)$$

setzen, erzielen wir die Identität $\beta_n E_n(\lambda_n) = I_n + \tau V(\xi')$. Für große Werte von n ist der Zusatzterm $\tau V(\xi')$ vernachlässigbar.

Dem Ausdruck (117) können und wollen wir jetzt eine völlig neue Interpretation geben: $E_n(\lambda)$ sei die Energie eines fiktiven Spinsystems mit den Spinvariablen ξ_i . Der erste Term ist eine Summe über gleichlautende Beiträge

¹⁸Es existiert keine Analogon des Lebesgue-Maßes (d.h. kein translationsinvariantes Maß) in Räumen unendlicher Dimension.

der individuellen Spins, also eine Summe über die *Gitterpunkte*. Der zweite Term dagegen stellt eine Summe über Energien dar, bei denen jeweils *zwei* benachbarte Spins beteiligt sind. Dieser Term kann folglich als eine Summe über die *Gitterkanten* aufgefaßt werden und beschreibt die “Zweikörperkräfte” des Spinsystems. Wenn man von den Randpunkten 0 und $n + 1$ des Gitter absieht, sind die Beiträge zur Energie, die von den Gitterpunkten und Gitterkanten kommen, überall im Gitter gleich: das unendlich ausgedehnte System ist translationsinvariant. Diese Tatsache spiegelt die zeitliche Homogenität des quantenmechanischen Ausgangssystems wieder und würde verlorengehen, wenn das N -Körperpotential $V(\xi)$ zeitabhängig wäre.

Indessen ist die Beschreibung des Spinsystems durch Angabe der Energien nicht vollständig. Wir benötigen noch die Vorgabe des a-priori-Maßes $d\mu(\xi)$, das uns sagt, mit welchem Gewicht die verschiedenen Werte des Spins ξ – unabhängig vom Gitterpunkt – in der Zustandssumme berücksichtigt werden sollen. Es liegt nahe, hierfür das Lebesgue-Maß zu wählen, d.h. wir setzen $d\mu(\xi) = d\xi$. Die Zustandssumme unter den Randbedingungen (112) hat jetzt die Form

$$Z_n(\beta, \lambda; \xi, \xi') = \int e^{-\beta E_n(\lambda)} \prod_{i=1}^n d\xi_i \quad (119)$$

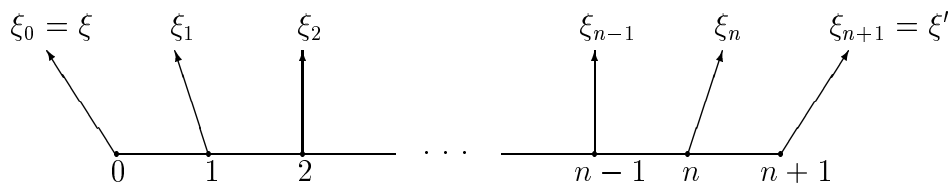
Dies ist nach Einsetzen von β_n und λ_n schon fast der Ausdruck links in (114). Er ist lediglich anders normiert. Völlige Gleichheit entsteht, wenn wir den Quotienten zweier Übergangsamplituden bilden, indem wir einmal das gewünschte Potential V , zum anderen $V = 0$ einsetzen. Sodann beachten wir (113) und erhalten

$$\langle \xi', s' | \xi, s \rangle = K_M(\xi' - \xi, s' - s) \lim_{n \rightarrow \infty} \frac{Z_n(\beta_n, \lambda_n; \xi, \xi')}{Z_n(\beta_n, 0; \xi, \xi')} \quad (120)$$

Die Übergangsamplitude wird bei dieser Vorschrift durch einen thermodynamischen Limes an einem Spinsystem konstruiert, bei dem aber gleichzeitig die Parameter β und λ volumenabhängig gewählt werden müssen, damit der Limes das Gewünschte leistet. Zwar wurde die Formel (120) aus einem Pfadintegral heraus entwickelt, der endgültige Ausdruck vermeidet jedoch das Pfadintegral und benutzt an seiner Stelle den thermodynamischen Formalismus.

Halten wir uns die wichtigsten Aussagen über das Spinsystem, mit dem wir das N -Körperproblem verknüpft haben, noch einmal vor Augen, so stellen wir fest:

1. Das Spinmodell besitzt nur eine Nächste-Nachbar-Wechselwirkung zwischen den Spins, nämlich die Energie $-\xi_i^T M \xi_{i+1}$. Alle anderen Anteile der Energie sind lokaler Natur, d.h. sie hängen nur von jeweils *einem* Gitterplatz ab.
2. Das Spinmodell ist translationsinvariant und gehört zur Klasse der ferromagnetischen Modelle; denn die Massenmatrix M ist grundsätzlich positiv. Benachbarte Spins tendieren dazu, sich parallel auszurichten. Sie müssen allerdings, durch die Randbedingungen gezwungen, zwischen dem Spin ξ an dem einen Ende und ξ' an dem anderen Ende des Gitters interpolieren.



Typische Konfiguration einer ferromagnetischen Spinkette

Eindimensionale Modelle dieser Art haben ihren kritischen Punkt bei der Temperatur Null ($\beta = \infty$). Deshalb gibt es in ihnen keinen Phasenübergang im eigentlichen Sinne. Nun gilt $\lim_n \beta_n = \infty$, und dies bedeutet: Bei der Konstruktion der quantenmechanischen Übergangsamplitude strebt das Spinmodell gegen seinen kritischen Punkt. Nur dort besteht die Äquivalenz beider Modelle. Der Grenzprozeß ist äußerst delikate. Denn dreierlei Dinge passieren gleichzeitig: (1) das Gitter wird unendlich groß, (2) β strebt nach Unendlich und (3) die Kopplung λ geht gegen Null. Diese drei Grenzprozesse sind so aufeinander abgestimmt, daß sie die Quantenmechanik des N -Körpersystems ergeben.

3.8 Von den Spinsystemen zur Mehlerschen Formel

Um die Tragfähigkeit der im vorigen Abschnitt dargestellten Ideen zu demonstrieren, wollen wir jetzt als ein Beispiel den harmonischen Oszillator in drei Dimensionen mit der neuen Methode behandeln und setzen also $H = -\frac{1}{2}\Delta + \frac{1}{2}k^2 x^2$. Ihm entspricht ein Spinsystem, dessen Zustandssumme für ein Gitter $\{0, 1, \dots, n+1\}$ der Länge $n+1$ ein $3n$ -dimensionales

Gaußisches Integral ist:

$$Z_n(\beta, \lambda; x, x') = \int d^3x_1 \cdots \int d^3x_n e^{-\beta E_n(\lambda)} \quad (121)$$

$$\begin{aligned} E_n(\lambda) &= \frac{1}{2} \sum_{i=0}^n (x_{i+1} - x_i)^2 + \frac{1}{2} \lambda k^2 \sum_{i=0}^{n+1} x_i^2 & (x_0 = x, x_{n+1} = x') \\ &= \frac{1}{2} x^T Q x - a^T x + \frac{1}{2} (1 + \lambda k^2) a^T a & (x, a \in \mathbb{R}^{3n}) \end{aligned} \quad (122)$$

mit $x = \{x_1, \dots, x_n\}^T$ und $a = \{x, 0, \dots, 0, x'\}^T$. Die hierbei auftretende $3n \times 3n$ -Matrix Q läßt sich auf einfache Weise durch eine ähnlich gestaltete $n \times n$ -Matrix R und die 3×3 -Einheitsmatrix $\mathbf{1}$ ausdrücken: $Q = R \otimes \mathbf{1}$.

$$Q = \begin{pmatrix} 2c\mathbf{1} & -\mathbf{1} & & & \\ -\mathbf{1} & 2c\mathbf{1} & \ddots & & \\ & & \ddots & \ddots & \\ & & & -\mathbf{1} & \\ & & & & -\mathbf{1} & 2c\mathbf{1} \end{pmatrix} \quad R = \begin{pmatrix} 2c & -1 & & & \\ -1 & 2c & \ddots & & \\ & & \ddots & \ddots & \\ & & & -1 & \\ & & & & -1 & 2c \end{pmatrix}$$

Hier haben wir $c = \cosh u = 1 + \frac{1}{2} \lambda k^2$ gesetzt und dadurch einen Parameter u eingeführt, mit dessen Hilfe die folgenden Formeln sich besonders einfach gestalten.

Es ist eine elementare Aufgabe, das Gaußische Integral auszuführen:

$$Z_n(\beta, \lambda; x, x') = [\det \frac{\beta Q}{2\pi}]^{-1/2} \exp\{-\frac{1}{2} \beta a^T (2c - 1 - Q^{-1}) a\} \quad (123)$$

Für die darin auftretende Determinante gilt offensichtlich

$$\det \frac{\beta Q}{2\pi} = \left(\frac{\beta}{2\pi}\right)^{3n} (\det R)^3$$

Es bleibt das Problem, $d_n := \det R$ zu bestimmen. Entwickeln wir die Determinante von R nach der letzten Zeile, so gelangen wir zu dem Rekursionschema

$$d_0 = 1, \quad d_1 = 2 \cosh u, \quad d_{n+1} + d_{n-1} = 2d_n \cosh u \quad (124)$$

Die Differenzgleichung wird durch $d_n = ae^{nu} + be^{-nu}$ gelöst und die Konstanten a und b werden durch die beiden Anfangsbedingungen bestimmt:

$$a + b = 1 \quad ae^u + be^{-u} = 2 \cosh u$$

Dies führt zu der Lösung

$$d_n = \det R = \frac{\sinh(n+1)u}{\sinh u} \quad (125)$$

Weiter wird von uns verlangt, den Vektor $y = Q^{-1}a$ zu bestimmen. Wir lösen zu diesem Zweck das Gleichungssystem $Qy = a$ äquivalent mit

$$2y_k \cosh u = \begin{cases} x + y_2 & k = 1 \\ y_{k-1} + y_{k+1} & k = 2, \dots, n-1 \\ y_{n-1} + x' & k = n \end{cases} \quad (126)$$

Wieder ist $y_k = ae^{ku} + be^{-ku}$ der lösende Ansatz, wobei die konstanten Vektoren a und b durch die erste und die letzte Gleichung bestimmt werden:

$$a + b = x \quad ae^{(n+1)u} + be^{-(n+1)u} = x'$$

Dies führt auf die Lösung

$$y_k = \frac{x \sinh(n-k+1)u + x' \sinh ku}{\sinh(n+1)u} \quad k = 1, \dots, n \quad (127)$$

und wir errechnen nun leicht

$$a^T Q^{-1}a = xy_1 + x'y_n = \frac{(x^2 + x'^2) \sinh nu + 2xx' \sinh u}{\sinh(n+1)u}$$

Noch eine kleine Umformung,

$$\sinh nu = \sinh(n+1)u \cosh u - \cosh(n+1)u \sinh u \quad ,$$

und wir sind am Ziel:

$$\begin{aligned} Z_n(\beta, \lambda; x, x') &= [(2\pi/\beta)^n w]^{3/2} \exp\{-\frac{1}{2}\beta[(x^2 + x'^2)v - 2xx'w]\} \\ v &= \frac{\sinh u}{\tanh(n+1)u} + \frac{1}{2}\lambda k^2 \\ w &= \frac{\sinh u}{\sinh(n+1)u} \quad \cosh u = 1 + \frac{1}{2}\lambda k^2 \end{aligned}$$

(128)

Für $\lambda \rightarrow 0$ (d.h. $u \rightarrow 0$) streben sowohl v als auch w gegen $(n+1)^{-1}$. Wir erhalten so

$$Z_n(\beta, 0; x, x') = \left[\frac{(2\pi/\beta)^n}{n+1} \right]^{3/2} \exp\left\{ -\frac{\beta(x' - x)^2}{2(n+1)} \right\} \quad (129)$$

Folgen wir den Vorschriften des letzten Abschnittes, so müssen wir einen thermodynamischen Limes $n \rightarrow \infty$ in einer Weise ausführen, bei der $\beta =$

$\beta_n := (n+1)(s' - s)^{-1}$ und $\lambda = \lambda_n := (n+1)^{-2}(s' - s)^2$ gesetzt wird. Mit $\nu = k(s' - s)$ kann man das Verhalten von u, v und w für große Werte von n bequem schreiben:

$$(n+1)u \rightarrow \nu \quad (n+1)v \rightarrow \frac{\nu}{\tanh \nu} \quad (n+1)w \rightarrow \frac{\nu}{\sinh \nu}$$

Man erhält also für das Verhältnis der beiden Zustandssummen:

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \frac{Z_n(\beta_n, \lambda_n; x, x')}{Z_n(\beta_n, 0; x, x')} = \left[\frac{\nu}{\sinh \nu} \right]^{3/2} \frac{\exp \left\{ -\frac{k(x^2 + x'^2)}{2 \tanh \nu} + \frac{kxx'}{\sinh \nu} \right\}}{\exp \left\{ -\frac{k(x-x')^2}{2\nu} \right\}} \quad (130)$$

Das Ergebnis hat man nur noch mit $K(x' - x, s' - s)$ zu multiplizieren, um die Übergangsamplitude des harmonischen Oszillators zu erhalten:

$$\begin{aligned} \langle x', s' | x, s \rangle &= \left[\frac{k}{2\pi \sinh \nu} \right]^{3/2} \exp \left\{ -\frac{k(x^2 + x'^2)}{2 \tanh \nu} + \frac{kxx'}{\sinh \nu} \right\} \\ k(s' - s) &= \nu \end{aligned}$$

(131)

(Mehlersche Formel). Dieses Resultat wurde von uns bereits früher (siehe (2.24)) zitiert.

Es ist nicht ohne Interesse zu erfahren, welche freie Energie pro Gitterplatz das Spinsystem besitzt. Die Rechnung dazu ist denkbar einfach:

$$f(\beta, \lambda) = - \lim_{n \rightarrow \infty} (\beta n)^{-1} \log Z_n(\beta, \lambda; x, x') = \frac{3}{2} \beta^{-1} \left(u + \log \frac{\beta}{2\pi} \right) \quad (132)$$

($2 \sinh(u/2) = \lambda^{1/2} k > 0$). Die freie Energie ist erwartungsgemäß unabhängig von den Randbedingungen (unabhängig von x und x'). Im Grenzfall verschwindender Kopplung finden wir:

$$f(\beta, 0) = \frac{3}{2} \beta^{-1} \log \frac{\beta}{2\pi} \quad (133)$$

Die Grundzustandsenergie des quantenmechanischen Oszillators ist $E_0 = \frac{3}{2} k$. Wir können sie aus der freien Energie durch einen Grenzprozeß gewinnen:

$$E_0 = \lim_{\substack{\beta \rightarrow \infty \\ \lambda \rightarrow 0 \\ \beta^2 \lambda \rightarrow 1}} \frac{f(\beta, \lambda) - f(\beta, 0)}{\lambda} \quad (134)$$

Ein Vergleich der Formeln (2.25), (2.64) und (2.76) lehrt, daß diese Relation nicht auf den harmonischen Oszillator beschränkt, sondern allgemeiner Natur ist.

4 Die Euklidische Feldtheorie: Die Kontinuumsformulierung

Die Sprache der Mathematik erweist sich als über alle Maßen effektiv, ein wunderbares Geschenk, das wir weder verstehen noch verdienen. Wir sollten dafür dankbar sein und hoffen, daß sie auch bei zukünftigen Forschungen ihre Gültigkeit behält und daß sie sich – in Freud und in Leid, zu unserem Vergnügen wie vielleicht auch zu unserer Verwirrung – auf viele Wissenszweige ausdehnt.

E.Wigner (1960)

4.1 Das euklidische Feld kann kein Operatorfeld sein

Für einen Vektor x des Minkowski-Raumes M_4 schreibt man nach Wahl eines Koordinatensystems $x = \{x^0, x^1, x^2, x^3\} = \{x^0, \mathbf{x}\}$ und erhält eine konkrete Form für die pseudo-euklidische Struktur von M_4 , indem man setzt:

$$x^2 = (x^0)^2 - (x^1)^2 - (x^2)^2 - (x^3)^2 = (x^0)^2 - \mathbf{x}^2$$

Seit der Entdeckung der Bedeutung dieser Struktur für die Physik durch Lorentz und Poincaré und der Ausformung der Theorie durch Einstein und Minkowski haben sich die Physiker immer wieder davon faszinieren lassen, wie leicht man durch eine einfache Ersetzung $ix^0 \rightarrow x^4$ die pseudo-euklidische Struktur in eine gewöhnliche *euklidische Struktur* verwandeln kann, bei der man von Vektoren $x = \{x^1, x^2, x^3, x^4\} = \{\mathbf{x}, x^4\} \in E_4$ ausgeht, für deren Normquadrat man nun schreibt:

$$x^2 = (x^1)^2 + (x^2)^2 + (x^3)^2 + (x^4)^2 = \mathbf{x}^2 + (x^4)^2$$

Bis auf ein Vorzeichen stimmen x^2 und \mathbf{x}^2 überein, und der unmittelbarer Vorteil der euklidischen Formulierung liegt auf der Hand: Man muß nicht mehr zwischen ko- und kontravarianten Komponenten unterscheiden, so daß $x_\alpha = x^\alpha$ für $\alpha = 1, \dots, 4$ gilt. Indessen, die Ersetzung ist rein formal und hat eher den Charakter eines Spieles mit gezinkten Karten. Die Räume M_4 und E_4 sind verschieden, und es gibt keine sinnvolle Weise sie zu identifizieren.

Die Angelegenheit erhielt neuen Auftrieb, als man lernte, die Zeit als ein komplexe Variable $z = x^4 + ix^0$ zu betrachten – wir haben diesen Standpunkt bereits im Abschnitt 1.3 vertreten und mit Erfolg angewandt –, wobei

x^0 weiterhin die Rolle der *anthropischen Zeit* übernimmt: das ist die Zeit, die wir Menschen zur Beschreibung unserer Umwelt und der Vorgänge darin benutzen, eine Form der Anschauung also im Sinne von Kant. Hier ist vermieden, von der physikalischen Zeit zu sprechen, weil dieser Begriff unklar und möglicherweise kontextabhängig ist. So haben wir etwa die Freiheit, in einer physikalischen Theorie die Zeit als eine komplexe Variable einzuführen. Dies ist immer dann sinnvoll, wenn es der Vereinfachung dient oder die Formulierung einer konsistenten Theorie überhaupt erst ermöglicht. Schreiben wir dann $z = x^4 + ix^0$, so ist x^4 eine *verborgene Variable* des Raum-Zeit-Kontinuums, weil sie der unmittelbaren menschlichen Anschauung entzogen ist. Sie ist aber nichtsdestoweniger eine physikalische Variable dieser Theorie¹⁹.

Es sei nun $\Phi(x)$ irgendein Operatorfeld über dem Minkowski-Raum, z.B. ein Skalarfeld. Dann gilt

$$\Phi(x^0, \mathbf{x}) = e^{ix^0 H} \Phi(0, \mathbf{x}) e^{-ix^0 H} \quad (135)$$

wobei H der Hamilton-Operator der Theorie ist. Eine naive und in die Irre führende Idee ist, hierin die Ersetzung $ix^0 \rightarrow x^4$ vorzunehmen, um so zu einem euklidischen Feld $\Phi(x)$ zu gelangen:

$$\Phi(\mathbf{x}, x^4) = e^{x^4 H} \Phi(\mathbf{x}, 0) e^{-x^4 H} \quad (136)$$

Zwar gilt $H \geq 0$, jedoch ist H nach oben unbeschränkt und wir haben das folgende Dilemma: gilt $x^4 > 0$, so ist der Operator $e^{x^4 H}$ nicht definiert; gilt $x^4 < 0$, so ist der Operator $e^{-x^4 H}$ nicht definiert²⁰.

Auch eine Fourier-Zerlegung des Operatorfeldes hilft uns nicht bei dieser Aufgabe. Schreiben wir nämlich etwa für eine Lösung der Klein-Gordon-Gleichung,

$$\Phi(x) = (2\pi)^{-3/2} \int \frac{d^3 p}{2\omega} \{ a(p) e^{-ipx} + b^\dagger(p) e^{ipx} \} \quad , \quad (137)$$

so gilt $p^0 = \omega > 0$. Da in dieser Darstellung sowohl positive wie negative Frequenzen auftreten, ist es uns wieder verwehrt, eine Ersetzung $ix^0 \rightarrow x^4$

¹⁹Ich möchte ganz entschieden der oft geäußerten Auffassung entgegenreten, daß die Einführung einer komplexen Zeit nur einen "mathematischen Trick" darstellt, dazu erfinden, um einige Rechnungen (Pfadintegrationen etc.) ausführen zu können und um Formeln einen Sinn zu geben, die sonst undefinierbar blieben. Das hieße, solche Rechnungen und die ihnen zugrunde liegende Theorie hätten nur einen formalen Charakter, und alles bliebe nur ein unverbindliches mathematisches Spiel.

²⁰Gemeint ist das Folgende. Der unitäre Operator $\exp(ix^0 H)$ ist überall auf dem Hilbertraum definiert und beschränkt. Diese Eigenschaft können nicht die Operatoren $\exp(x^4 H)$ und $\exp(-x^4 H)$ zugleich besitzen, wenn H unbeschränkt ist.

mit reellem x^4 vorzunehmen. Denn entweder wird dadurch der erste Teil des Integrals sinnlos (für $x^4 < 0$) oder der zweite Anteil wird sinnlos (für $x^4 > 0$).

Die kurze Diskussion hat gezeigt, daß man nicht hoffen kann, das euklidische Feld als ein Operatorfeld in die Feldtheorie einführen zu können, so daß es mit seinem Partner, dem Feld in der Minkowski-Darstellung, durch eine analytische Fortsetzung in der Zeit verbunden ist. Nicht einmal die wohlvertrauten freien Felder lassen sich in natürlicher Weise zu analytischen Funktionen von einer komplexen Variablen $z = x^4 + ix^0$ erweitern²¹. Die nächsten Abschnitte werden die Frage beantworten, wie wir das euklidische Feld nun wirklich aufzufassen haben. Dabei haben wir die Wahl zwischen zwei Möglichkeiten:

- Das euklidische Feld ist eine Zufallsvariable, oder besser, ein Zufallsfeld, also ein verallgemeinerter stochastischer Prozeß. Dies soll die *stochastische Auffassung* genannt werden.
- Das euklidische Feld ist die verallgemeinerte Spinvariable eines vierdimensionalen ferromagnetischen Gittermodells. Damit wird es als ein System der statistischen Mechanik am kritischen Punkt betrachtet. Dies wollen wir die *statistische Auffassung* nennen.

In abgewandelter Form begegneten uns beide Auffassungen bereits im Kapitel 2 im Zusammenhang mit der Feynman-Kac-Formel. Die Pfadintegralmethode stand für die stochastische Auffassung der Quantenmechanik. Die statistische Auffassung, d.h. die Beschreibung durch Spingitter entstand durch eine Diskretisierung des Pfadintegrals. Eine Verallgemeinerung des Ansatzes von Feynman und Kac führt uns auf die Funktionalintegrale der Feldtheorie. Auch diese Integrale haben in R.Feynman ihren geistigen Vater.

4.2 Die euklidische Zweipunktfunktion

Die analytische Fortsetzung des Minkowski-Feldes zu einem euklidischen Feld kann nicht gelingen. Unsere Absicht ist vielmehr, Vakuumerwartungswerte eines Produktes von Feldoperatoren – die sog. n -Punktfunktionen, oder *Wightman-Funktionen* – analytisch fortzusetzen. Die so gewonnenen euklidischen n -Funktionen, die sog. *Schwinger-Funktionen*, haben besondere Eigenschaften, die es erlauben, sie wieder als Erwartungswerte zu deuten. Hierbei handelt es sich allerdings nicht um Erwartungswerte im Sinne der Operatortheorie, sondern um Mittelwerte im Sinne der (kommutativen) Wahrscheinlichkeitstheorie.

²¹Konkret: Erwartungswerte der Form $(\phi, \Phi(x)\phi)$ mit ϕ aus dem Definitionsbereich des Operatorfeldes sind i.allg. nicht analytisch in der Zeit.

Es sei $\Phi(x)$ irgendein Operatorfeld über dem Minkowski-Raum. Um konkret zu bleiben, könnte man hierbei an ein reelles Skalarfeld denken, obwohl das folgende Argument auf alle Felder, die Eichfelder eingeschlossen, zutrifft. Die Zweipunktfunktion

$$W(x - y) = (\Omega, \Phi(x)\Phi(y)\Omega) \quad (138)$$

hängt wegen der Translationsinvarianz des Vakuums nur von der Differenz $x - y$ ab und kann als ein "Matrixelement" des Evolutionsoperators e^{-itH} mit $t = x^0 - y^0$ aufgefaßt werden. Indem wir die Ersetzung $x \rightarrow \frac{1}{2}x$, $y \rightarrow -\frac{1}{2}x$ vornehmen, können wir vereinfachend schreiben:

$$W(x) = (\Phi(0, \frac{1}{2}\mathbf{x})^*\Omega, e^{-ix^0H}\Phi(0, -\frac{1}{2}\mathbf{x})\Omega) \quad (139)$$

Hierdurch wird klar, daß $W(x)$ eine analytische Fortsetzung in x^0 (nicht aber in x^1, x^2, x^3 , warum?) besitzt. Für die analytische Funktion benutzt man ein neues Funktionssymbol,

$$S(\mathbf{x}, z) = (\Phi(0, \frac{1}{2}\mathbf{x})^*\Omega, e^{-zH}\Phi(0, -\frac{1}{2}\mathbf{x})\Omega) \quad (140)$$

$$z = x^4 + ix^0 \quad x^4 > 0 \quad , \quad (141)$$

und kann somit behaupten, daß die ursprüngliche Funktion $W(x)$ Randwert einer analytischen Funktion ist:

$$W(x^0, \mathbf{x}) = \lim_{x^4 \downarrow 0} S(\mathbf{x}, x^4 + ix^0)$$

Diese Randwerte existieren nur im Sinne einer Distribution, was die Ursache vieler Schwierigkeiten der Minkowski-Formulierung der Feldtheorie ist. Hingegen liegen die reellen Punkte $z = x^4 > 0$ im Analytizitätsgebiet. In diesen Punkten gewinnen wir die nicht-singuläre euklidische Zweipunktfunktion $S(\mathbf{x}) = S(\mathbf{x}, x^4)$ (Schwinger-Funktion). Eine Singularität haben wir allenfalls zu erwarten, wenn x^4 gegen Null strebt. Tatsächlich begegnen wir dort einem Pol, sobald $\mathbf{x} = 0$ ist.

Beispiel. $\Phi(x)$ sei ein reelles Skalarfeld der Masse m , mithin eine Lösung der Klein-Gordon-Gleichung. Die Zweipunktfunktion eines solchen Feldes ist

$$W(x) = \Delta_+(x, m) = \frac{1}{(2\pi)^3} \int \frac{d^3p}{2\omega} e^{i(\mathbf{p}\mathbf{x} - \omega x^0)} \quad (142)$$

($\omega = \sqrt{m^2 + \mathbf{p}^2}$), und somit finden wir

$$S(x, m) = \frac{1}{(2\pi)^3} \int \frac{d^3p}{2\omega} e^{i\mathbf{p}\mathbf{x} - \omega x^4} \quad (143)$$

Allerdings gilt diese Darstellung nur für $x^4 > 0$. Wir wünschen uns die Darstellung durch ein vierdimensionales Integral, das die $O(4)$ -Invarianz der euklidischen Zweipunktfunktion offenbart. Dies gelingt so. Zunächst führen wir einen euklidischen Impuls $p = \{p^1, p^2, p^3, p^4\} = \{\mathbf{p}, p^4\}$ ein, für dessen Quadrat wir $p^2 = \sum_{\alpha} (p^{\alpha})^2$ schreiben. Sodann behaupten wir:

Lemma

$$\frac{1}{2\omega} e^{-\omega x^4} = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dp^4 \frac{e^{ip^4 x^4}}{p^2 + m^2} \quad (144)$$

Beweis. Betrachte die Funktion $f(u) = (u^2 - \omega^2)^{-1} e^{-ux^4}$. Sie ist analytisch in der Halbebene $u = p^0 - ip^4$, $p^0 > 0$ mit Ausnahme der Stelle $u = \omega$, wo $f(u)$ einen Pol besitzt. Integrieren wir nun $f(u)$ entlang des Weges C (siehe die Abbildung) in der komplexen u -Ebene, so erhalten wir nach dem Residuensatz:

$$\frac{1}{2\pi i} \int_C du f(u) = \text{Res}_{u=\omega} f(u) = \frac{1}{2\omega} e^{-\omega x^4} \quad (145)$$

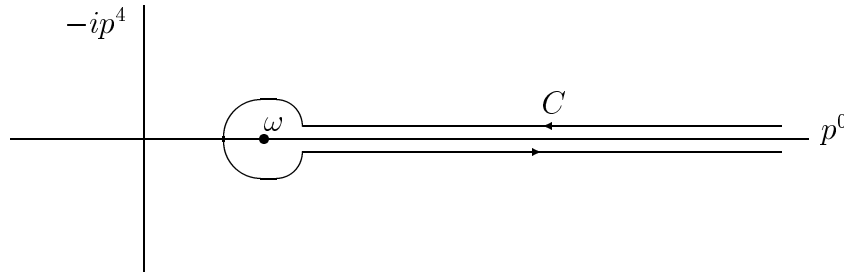


Abbildung 1: Der Integrationsweg C in der komplexen u -Ebene

Die Funktion $f(u)$ fällt in der rechten Halbebene exponentiell ab. Wir dürfen also den Integrationsweg so deformieren, daß er parallel zur imaginären Achse im Abstand p^0 verläuft, falls $0 < p^0 < \omega$ gilt. Für das Integral erhalten nun die Darstellung

$$-\frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dp^4 f(p^0 - ip^4) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dp^4 \frac{e^{ip^4 x^4 - p^0 x^4}}{\mathbf{p}^2 + (p^4 + ip^0)^2 + m^2} = \frac{1}{2\omega} e^{-\omega x^4}$$

Die Wahl von p^0 ist uns überlassen. Bei dem Versuch, den Limes $p^0 \rightarrow 0$ auszuführen, sehen wir, daß dies sogar unter dem Integral möglich ist, und gelangen so zu der Aussage des Lemmas. q.e.d.

Führen wir schließlich das euklidische Produkt $px = \sum_{\alpha} p^{\alpha} x^{\alpha}$ ein, so haben wir endgültig:

$$S(x, m) = \frac{1}{(2\pi)^4} \int d^4p \frac{\exp(ipx)}{p^2 + m^2} \quad (146)$$

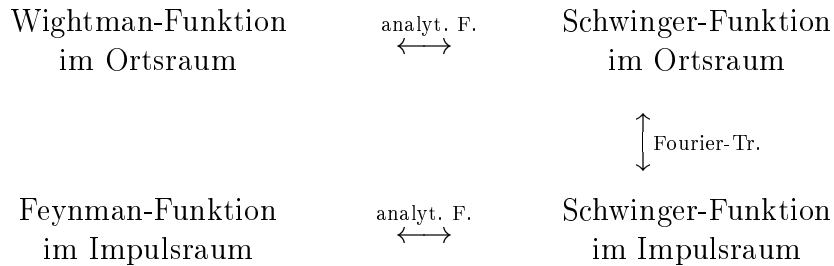
Man kann aber auch $S(x, m)$ durch die *modifizierte Besselfunktion* K_1 ausdrücken:

$$S(x, m) = \begin{cases} (2\pi)^{-2} m |x|^{-1} K_1(m|x|) & m > 0 \\ (2\pi)^{-2} |x|^{-2} & m = 0 \end{cases} \quad |x| = \sqrt{x^2} \quad (147)$$

Die Formel (146) zeigt eine auffällige Verwandtschaft zwischen der Schwinger-Funktion $S(x, m)$ und der Feynman-Funktion

$$\Delta_F(x, m) = \frac{1}{(2\pi)^4} \int d^4p \frac{\exp(-ipx)}{p^2 - m^2 + i0}$$

einer Minkowski-Feldtheorie. Man macht sich schnell klar, daß $-p^2$ und p^2 durch eine analytische Fortsetzung in der Energie auseinander hervorgehen: die Fourier-Transformierte $\tilde{\Delta}_F(p, m)$ ist – abgesehen von einem Vorzeichen – die analytische Fortsetzung von $\tilde{S}(p, m)$. Insgesamt erhalten wir das folgende Bild über die Weise, wie Wightman-Funktionen und Feynman-Funktionen miteinander verknüpft sind, ohne daß dabei von der mehrdeutigen Vorschrift der Zeitordnung Gebrauch gemacht wird:



Wir notieren einige Eigenschaften der Schwinger-Funktion:

1. Obwohl die Funktion $S(x, m)$ nur für positive Zeiten ($x^4 > 0$) definiert wurde, können wir sie zu einer symmetrischen Funktion auf der gesamten reellen Zeitachse erweitern. Hierbei wird allerdings der Ursprung des euklidischen Raumes zu einem singulären Punkt. In der Nähe dieses Punktes verhält sich die Funktion wie $1/x^2$. Die Singularität ist integrierbar.

2. Die Schwinger-Funktion ist reell und positiv. Ebenso ist die Fourier-Transformierte reell und positiv.
3. Die Schwinger-Funktion ist invariant unter euklidischen Rotationen. Die Gruppe $O(4)$ tritt an die Stelle der Lorentz-Gruppe (mit Spiegelungen).
4. $S(x, m)$ ist die Greensche Funktion für den Differentialoperator $-\Delta + m^2$, d.h. es gilt

$$(-\Delta + m^2)S(x, m) = \delta^4(x) \quad (148)$$

wobei Δ den vierdimensionalen Laplace-Operator bezeichnet. Die euklidische Formulierung hat uns hier einen elliptischen Differentialoperator beschert; der Klein-Gordon-Operator war hyperbolisch. Wir benötigen nun keine $i\epsilon$ -Vorschrift mehr zur Invertierung von $-\Delta + m^2$: der inverse Operator ist eindeutig und besitzt den Integralkern $S(x - x', m)$.

5. Die Schwinger-Funktion zerfällt *exponentiell* für große Abstände vom Ursprung (falls $m > 0$):

$$S(x, m) \rightarrow \frac{m^2/2}{(2\pi m|x|)^{3/2}} \exp\{-m|x|\} \quad |x| \rightarrow \infty \quad (149)$$

Insbesondere existiert das Integral $\int d^4x S(x, m) = m^{-2}$.

4.3 Das freie euklidische Skalarfeld

4.3.1 Die n-Punktfunktionen

In der Minkowski-Formulierung kann ein reelles Skalarfeld $\Phi(x)$ durch die Gesamtheit seiner n -Punktfunktionen (Wightman-Funktionen)

$$W_n(x_1, \dots, x_n) = (\Omega, \Phi(x_1) \cdots \Phi(x_n)\Omega) \quad , \quad (150)$$

definiert werden. Der Operatorcharakter des Feldes und die quantenmechanische Natur der Theorie äußert sich in $[\Phi(x), \Phi(x')] \neq 0$. Aus diesem Grunde sind die Wightman-Funktionen *nicht symmetrisch* unter Permutationen ihrer Argumente: dies erschwert die Konstruktion eines erzeugenden Funktionals, aus dem sie gewonnen werden könnten.

Eine andere Weise, das Feld zu definieren, geschieht durch die Angabe aller seiner τ -Funktionen (Greenschen Funktionen)

$$\tau_n(x_1, \dots, x_n) = (\Omega, T(\Phi(x_1) \cdots \Phi(x_n))\Omega) \quad (151)$$

Diese Funktionen sind symmetrisch und besitzen das erzeugende Funktional

$$F(j) = (\Omega, T \exp\{i\Phi(j)\}\Omega) = 1 + \sum_{n=1}^{\infty} \frac{i^n}{n!} (\Omega, \Phi(j)^n \Omega) \quad (152)$$

mit $\Phi(j) = \int d^4x \Phi(x)j(x)$ und $j(x)$ reell. Handelt es sich dabei um ein freies Feld der Masse m , so ist das erzeugende Funktional bereits vollständig durch die ersten beiden τ -Funktionen, $\tau_1(x) = (\Omega, \Phi(x)\Omega) = c$ und $\tau_2(x, y) = i\Delta_F(x - y, m)$, bestimmt²²:

$$\log F(j) = icI(j) - \frac{1}{2}i\Delta_F(j * j, m) \quad (153)$$

$$I(j) = \int d^4x j(x)$$

$$\Delta_F(j * j, m) = \int d^4x \int d^4y j(x)\Delta_F(x - y, m)j(y) \quad (154)$$

Für $c = 0$ ist diese Charakterisierung äquivalent einer rekursiven Definition der τ -Funktionen in der folgenden Art:

$$\begin{aligned} \tau_1(x_1) &= 0 \\ \tau_2(x_1, x_2) &= i\Delta_F(x_1 - x_2, m) \\ \tau_n(x_1, \dots, x_n) &= \sum_{k=1}^{n-1} \tau_{n-2}(x_1, \dots, \hat{x}_k, \dots, x_{n-1})i\Delta_F(x_k - x_n, m) \end{aligned} \quad (155)$$

(Der Hut $\hat{}$ über einer Variablen bedeutet: diese Variable wurde eliminiert). Für die Wightman-Funktionen existiert ein Schema ähnlicher Art:

$$\begin{aligned} W_1(x_1) &= 0 \\ W_2(x_1, x_2) &= \Delta_+(x_1 - x_2, m) \\ W_n(x_1, \dots, x_n) &= \sum_{k=1}^{n-1} W_{n-2}(x_1, \dots, \hat{x}_k, \dots, x_{n-1})\Delta_+(x_k - x_n, m) \end{aligned} \quad (156)$$

Diesen Formeln entnimmt man, daß W_n eine analytische Fortsetzung in allen Zeitvariablen x_1^0, \dots, x_n^0 besitzt, weil die Δ_+ -Funktion eine solche Fortsetzung gestattet. Wir können somit zu komplexen Variablen $z_k = x_k^4 + ix_k^0$ der punktierten komplexen Ebene $\mathbb{C} \setminus \{0\}$ übergehen. In den reellen Punkten $z_k = x_k^4$ erhalten wir dann die n -Punktfunktionen (Schwinger-Funktionen) des zugehörigen euklidischen Feldes:

$$S_n(x_1, \dots, x_n) = W_n(x_1, \dots, x_n) \Big|_{ix_k^0 \rightarrow x_k^4} \quad (157)$$

²²Siehe das Kapitel 6.6 der Vorlesung QFT I.

Für die euklidischen Funktionen existiert somit das Rekursionsschema

$$\begin{aligned} S_1(x_1) &= 0 \\ S_2(x_1, x_2) &= S(x_1 - x_2, m) \\ S_n(x_1, \dots, x_n) &= \sum_{k=1}^{n-1} S_{n-2}(x_1, \dots, \hat{x}_k, \dots, x_{n-1}) S(x_k - x_n, m) \end{aligned} \quad (158)$$

und aus $S(-x, m) = S(x, m)$ folgt, daß *Schwinger-Funktionen grundsätzlich symmetrisch sind* gegenüber Permutationen ihrer Argumente. Diese wichtige Tatsache gibt uns wiederum die Möglichkeit, die Gesamtheit der Funktionen S_n aus einem erzeugenden Funktional abzuleiten (wir erlauben wieder $c \neq 0$):

$$\log S\{f\} = icI(f) - \frac{1}{2}S(f * f, m) \quad (159)$$

$$I(f) = \int d^4x f(x)$$

$$\begin{aligned} S(f * f, m) &= \int d^4x \int d^4y f(x) S(x - y, m) f(y) \\ &= (f, (-\Delta + m^2)^{-1} f) \end{aligned} \quad (160)$$

$$S\{f\} = 1 + \sum_{n=1}^{\infty} \frac{i^n}{n!} \int d^4x_1 \cdots \int d^4x_n S_n(x_1, \dots, x_n) f(x_1) \cdots f(x_n)$$

Auch hier soll f wieder eine reelle Funktion sein. Man nennt $S\{f\}$ das *Schwinger-Funktional* des euklidischen Feldes. Da $S(f * f, m) \geq 0$ gilt (und = 0 nur für $f = 0$), ist $S\{f\}$ ein Gaußisches Funktional.

4.4 Die stochastische Interpretation

Da die euklidischen n -Punktfunktionen symmetrisch sind, ist es möglich, sie als Korrelationsfunktionen im Sinne der Stochastik zu deuten. Die Idee ist also, das euklidische Feld $\Phi(x)$ als eine *Zufallsvariable* einzuführen, so daß gilt:

$$\langle \Phi(x) \rangle = c \quad \langle \Phi(x)\Phi(y) \rangle - \langle \Phi(x) \rangle \langle \Phi(y) \rangle = S(x - y, m) \quad (161)$$

Mit $\langle \cdot \rangle$ wäre dann der Mittelwert oder Erwartungswert im Sinne der Wahrscheinlichkeitstheorie gemeint. Alle höheren Korrelationsfunktionen $\langle \Phi(x_1) \cdots \Phi(x_n) \rangle$ ließen sich daraus rekursiv berechnen. Eine Schwierigkeit hat diese Auffassung jedoch: Falls in der Formel (161) $x = y$ gesetzt wird, erhalten wir den singulären Ausdruck $S(0, m) = \infty$. Wir sind, ähnlich wie in der Operatorfeldtheorie, auch hier gezwungen, ein Glättungsverfahren anzuwenden, um dem euklidischen Feld den singulären Charakter zu nehmen.

Wir wählen also einen geeigneten Raum von Testfunktionen $f : E_4 \rightarrow \mathbb{R}$ und betrachten nunmehr nur noch die integrierten Größen $\Phi(f) = \int d^4x \Phi(x)f(x)$ als die eigentlichen Zufallsvariablen. Diese Auffassung zeigt keinerlei Probleme, Korrelationsfunktionen der Art $\langle \Phi(f_1) \cdots \Phi(f_n) \rangle$ sind wohldefiniert. Grund: die Singularität $1/x^2$ ist in vier Dimensionen integrierbar. Durch Entwicklung der Exponentialfunktion können die Korrelationsfunktionen n -ter Ordnung aus dem erzeugenden Funktional

$$\log \langle \exp\{i\Phi(f)\} \rangle = icI(f) - \frac{1}{2}(f, (-\Delta + m^2)^{-1}f) \quad (162)$$

gewonnen werden. Unsere Vorschriften erlauben die Berechnung von beliebigen Korrelationen, wir kennen jedoch noch nicht die zugrunde liegenden Verteilungen (W-Maße). Unser nächstes Ziel ist deshalb die Konstruktion der mit dem euklidischen Feld verknüpften n -dimensionalen Gaußischen Verteilungen. Wir setzen zur Vereinfachung $c = 0$. Die allgemeine Situation $c \neq 0$ läßt sich immer durch eine einfache Translation des Feldes daraus herstellen.

Der Fall $n=1$. Im erzeugenden Funktional ersetzen wir f durch tf und variieren den reellen Parameter t . Wir erhalten so die Darstellung

$$\langle \exp\{it\Phi(f)\} \rangle = e^{-at^2/2} = \int d\mu(\alpha) e^{it\alpha} \quad (163)$$

mit $a = (f, (-\Delta + m^2)^{-1}f)$; μ ist das gesuchte W-Maß, das die Verteilung der "Meßwerte" von $\Phi(f)$ beschreibt. Die möglichen Werte α , die diese Zufallsvariable annehmen kann, liegen auf der reellen Achse, weil wir von einem reellen Skalarfeld ausgingen. Die offensichtliche Lösung lautet:

$$d\mu(\alpha) = d\alpha (2\pi a)^{-1/2} e^{-(2a)^{-1}\alpha^2} \quad (164)$$

Die Konstante a übernimmt hierbei die Rolle der *Varianz* der Verteilung.

Der allgemeine Fall. Im erzeugenden Funktional ersetzen wir f durch $\sum_{k=1}^n t_k f_k$ mit linear unabhängigen Testfunktionen f_k und variieren die reellen Parameter t_k :

$$\langle \exp\{i \sum_k t_k \Phi(f_k)\} \rangle = \exp \left\{ -\frac{1}{2} \sum_{j,k=1}^n t_j t_k a_{jk} \right\} \quad (165)$$

$$(f_j, (-\Delta + m^2)^{-1} f_k) = a_{jk} \quad (166)$$

Es sei A die $n \times n$ -Matrix mit den Elementen a_{jk} . Sie ist symmetrisch und strikt positiv (0 ist kein Eigenwert); denn es gilt $\sum t_j t_k a_{jk} = (f, (-\Delta + m^2)^{-1} f) \geq 0$, und dieser Ausdruck verschwindet nur für $f = 0$, also für $t_k = 0$, weil das System (f_k) linear unabhängig vorausgesetzt war. Mit

$\alpha_1, \dots, \alpha_n$ bezeichnen wir die möglichen ‘‘Meßwerte’’ von $\Phi(f_1), \dots, \Phi(f_n)$. Die gemeinsame Verteilung dieser Werte wird durch ein W-Maß μ beschrieben, das wir aus der Gleichung

$$\langle \exp\{i \sum t_k \Phi(f_k)\} \rangle = \int d\mu(\alpha_1, \dots, \alpha_n) \exp\{i \sum t_k \alpha_k\} \quad (167)$$

zu bestimmen haben. Eine Fourier-Transformation löst das Problem, und wir finden (beachte $\det A > 0$):

$$d\mu(\alpha_1, \dots, \alpha_n) = [\det(2\pi A)]^{-1/2} \exp \left\{ -\frac{1}{2} \sum_{j,k=1}^n \alpha_j \alpha_k (A^{-1})_{jk} \right\} \prod_{k=1}^n d\alpha_k \quad (168)$$

Ergebnis: alle n -dimensionalen Verteilungen sind Gaußisch.

Fassen wir den Inhalt der vorstehenden mathematischen Analyse in Worte und stellen die allgemeine Situation $c \neq 0$ wieder her, so können wir sagen:

Das freie euklidische Feld $\Phi(x)$ ist ein verallgemeinerter Gauß-Prozeß über dem euklidischen Raum E_4 mit dem Mittelwert $\langle \Phi(x) \rangle = c$ (Kondensat) und der Kovarianz

$$\langle \Phi(x)\Phi(y) \rangle - \langle \Phi(x) \rangle \langle \Phi(y) \rangle = (-\Delta + m^2)^{-1}(x, y) = S(x - y, m)$$

(euklidischer Propagator).

Die hierin angesprochene Verallgemeinerung geschieht auf zwei Weisen:

1. Die Halbachse \mathbb{R}_+ , die normalerweise in die Formulierung eines stochastischen Prozesses als wesentliches Strukturelement eingeht und inhaltlich als die SZeit interpretiert wird, ist in der euklidischen Feldtheorie ersetzt worden durch den Raum E_4 .
2. Die singuläre Natur des Feldes macht es notwendig, nur die mit Testfunktionen f integrierten Größen $\Phi(f)$ als die eigentlichen Zufallsvariablen aufzufassen. Es ist bequem (nicht zwingend) f aus dem Raum $\mathcal{S}(E_4)$ (Schwartz-Raum) zu wählen.

Allgemeiner Sprachgebrauch: Es sei $\Phi(x)$ ein verallgemeinerter Gauß-Prozeß und $f \mapsto \Phi(f)$ die zugehörige lineare Abbildung von Testfunktionen in Zufallsvariablen. Schließlich existiere ein linearer Operator K , so daß

$$\langle \Phi(f)\Phi(g) \rangle - \langle \Phi(f) \rangle \langle \Phi(g) \rangle = (f, Kg) \quad (169)$$

die Kovarianz des Prozesses ist (f und g sind beliebig). Dann heißt K der *Kovarianzoperator*. Man erzielt somit eine sinnvolle Verallgemeinerung des Begriffs der *Kovarianzmatrix* einer stochastischen Variablen mit Werten im \mathbb{R}^n . Der Prozeß heißt *zentriert*, falls $\langle \Phi(f) \rangle = 0$ für alle f gilt. Der Kovarianzoperator des euklidischen Feldes ist $(-\Delta + m^2)^{-1}$. Das Feld ist zentriert, wenn das Kondensat verschwindet: $c = 0$.

4.5 Gaußische Funktionalintegrale

Die Überlegungen des vorigen Abschnittes geben Anlaß zu der Konstruktion eines Funktionalintegrals spezieller Art, mit dessen Hilfe das Schwinger-Funktional des freien euklidischen Feldes ausgedrückt werden kann. Wir vereinbaren, daß die zulässigen Testfunktionen, die wir für die Glättung benutzen, dem Raum $\mathcal{S}(E_4)$ angehören. Dies ist ein reell-linearer Raum. Die Elemente des Dualraumes $\mathcal{S}'(E_4)$ heißen *Distributionen*. Jede Distribution $\phi \in \mathcal{S}'(E_4)$ ist somit ein lineares Funktional $\phi(f) = \int d^4x \phi(x)f(x)$, das jedem $f \in \mathcal{S}(E_4)$ eine reelle Zahl zuordnet. Das zu konstruierende Funktionalintegral ist vom Gaußischen Typ und erstreckt sich über alle Distributionen ϕ , in denen wir die Verallgemeinerung der Brownschen Pfade erkennen. Die typische Distribution ist nicht einer glatten Funktion äquivalent. Ähnliches galt für die Brownschen Pfade. Und nun zur Konstruktion selbst.

Es sei F ein beliebiger n -dimensionaler Unterraum von $\mathcal{S}(E_4)$ und F' sein Dualraum, den wir uns als Teilraum von $\mathcal{S}'(E_4)$ denken. Nach Wahl einer Basis $(f_k)_{k=1,\dots,n}$ in F , so daß jedes $f \in F$ als $\sum_{k=1}^n t_k f_k$ darstellbar ist, können wir die reellen Koeffizienten t_k als die Koordinaten des Vektors f auffassen. Es existiert dann immer eine duale Basis $(f'_k)_{k=1,\dots,n}$ in F' , so daß $f'_j(f_k) = \delta_{jk}$ gilt. Für einen Vektor $\phi = \sum_{k=1}^n \alpha_k f'_k \in F'$ mit den Koordinaten α_k und $f \in F$ mit den Koordinaten t_k folgt: $\phi(f) = \sum t_k \alpha_k$. Die Fourier-Zerlegung

$$\langle \exp\{i \sum t_k \Phi(f_k)\} \rangle = \int d\mu(\alpha_1, \dots, \alpha_n) \exp\{i \sum t_k \alpha_k\} \quad , \quad (170)$$

wie sie im vorigen Abschnitt vorgenommen wurde, leistet somit das folgende: sie erzeugt auf *jedem* Teilraum $F' \in \mathcal{S}'(E_4)$ endlicher Dimension ein W-Maß μ . Dieses Maß beschreibt die gemeinsame Verteilung aller Zufallsvariablen $\Phi(f)$ mit $f \in F$. Es ist eine Tatsache, daß immer dann, wenn eine solche Situation gegeben ist, ein W-Maß μ auf dem ∞ -dimensionalen Raum $\mathcal{S}'(E_4)$ vorliegt.

Es sei also (f, Kf) eine strikt positive quadratische Form auf $\mathcal{S}(E_4)$. Dann ist ihr ein zentriertes Gaußisches Maß μ auf $\mathcal{S}'(E_4)$ zugeordnet, dessen Fourier-Transformierte (das charakteristische Funktional des Maßes) durch

$$\int d\mu(\phi) \exp\{i\phi(f)\} = \exp\{-\frac{1}{2}(f, Kf)\} \quad (171)$$

gegeben ist. Konkret ist damit gemeint: Nach Wahl eines beliebigen Teilraumes $F \in \mathcal{S}(E_4)$ mit $\dim F = n < \infty$ und einer Basis (f_k) in F kann man (171) als ein n -dimensionales Gauß-Integral über die Koordinaten $\alpha_k = \phi(f_k)$ von

ϕ schreiben, und diese Darstellung hat Gültigkeit für alle $f = \sum t_k f_k \in F$, indem

$$\int d\mu(\phi) \exp\{i\phi(f)\} = \int d\mu(\alpha_1, \dots, \alpha_n) \exp\{i \sum t_k \alpha_k\} \quad (172)$$

$$= \exp\{-\frac{1}{2} \sum t_j t_k a_{jk}\} \quad (173)$$

$$a_{jk} = (f_j, K f_k) \quad (174)$$

Natürlich ist eine Schreibweise wie (171) nur deshalb sinnvoll, weil das Ergebnis unabhängig von der Wahl der Basis ist.

Das Schwinger-Funktional des euklidischen Feldes schreiben wir nun als Gaußsches Funktionalintegral (=Integral über Funktionale ϕ) in dem vorgenannten Sinne:

$$\langle \exp\{i\Phi(f)\} \rangle = \int d\mu(\phi) \exp\{i\phi(f)\} = \exp\{icI(f) - \frac{1}{2}(f, K f)\} \quad (175)$$

mit dem Kovarianzoperator $K = (-\Delta + m^2)^{-1}$. Gilt $\langle \Phi(x) \rangle = 0$, so ist das Maß μ zentriert. Diese Situation läßt sich immer durch eine Verschiebung $\phi \rightarrow \phi + c$ herstellen. Es hilft der Anschauung, wenn man sich Distributionen $\phi(x)$, über die integriert wird, als "Pfade" des Feldes $\Phi(x)$ im Raum E_4 vorstellt. Das Integral (175) realisiert, was Feynman anstrebte und *sum over histories* nannte. Setzt man darin $f = \sum t_k f_k$ und entwickelt nach t_1, \dots, t_n , so entsteht die Gleichung

$$\langle \Phi(f_1) \cdots \Phi(f_n) \rangle = \int d\mu(\phi) \phi(f_1) \cdots \phi(f_n) \quad (176)$$

Sobald die Testfunktionen f_k fixiert sind, ist die rechte Seite einem gewöhnlichen n -dimensionalen Integral äquivalent. Man schreibt auch

$$\langle \Phi(x_1) \cdots \Phi(x_n) \rangle = \int d\mu(\phi) \phi(x_1) \cdots \phi(x_n) \quad (177)$$

Doch dies ist nur mehr eine symbolische Darstellung der n -Punktfunktion. Die rechte Seite wird erst zu einem gewöhnlichen Integral, wenn wir sie zuvor mit Testfunktionen $f_1(x_1) \cdots f_n(x_n)$ integrieren, d.h. wenn wir zu der Schreibweise (176) zurückkehren.

Andere Schreibweisen sind in Gebrauch, die in einem noch stärkeren Maße formal genannt werden müssen. So schreibt der Physiker – in Anlehnung an bekannte Formeln für die Gauß-Integration bei $n \times n$ -Matrizen –

$$d\mu(\phi) = c \mathcal{D}\phi \exp\{-\frac{1}{2}(\phi, (-\Delta + m^2)\phi)\} \quad (178)$$

Die Konstante c sei so gewählt, daß das Maß normiert ist: $\int d\mu(\phi) = 1$. Diese "Definitionist streng betrachtet unsinnig. Denn die Formel (178) enthält drei Größen, die für sich genommen einzeln nicht existieren:

- Die Konstante $c^{-1} = \int \mathcal{D}\phi \exp\{-\frac{1}{2}(\phi, (-\Delta + m^2)\phi)\}$ ist eine sinnlose Größe; c^2 ist formal identisch mit der Determinante des Operators $(-\Delta + m^2)/(2\pi)$. Dieser Operator besitzt ein rein kontinuierliches Spektrum, und eine Determinante kann in einer solchen Situation nicht definiert werden.
- Das Lebesgue-Maß $\mathcal{D}\phi$ kann auf $\mathcal{S}'(E_4)$ genau so wenig definiert werden, wie auf jedem anderen ∞ -dimensionalen Vektorraum.
- Für fast alle Distributionen ist $(\phi, (-\Delta + m^2)\phi)$ eine nicht definierbare Größe (man mache die Probe mit $\phi(x) = \delta^4(x)$ oder $\Theta(x^4)$!).

Dennoch kann man von der Schreibweise (178) legitimen Gebrauch machen, falls festgelegt wird, daß *nur das Produkt der drei Faktoren zusammengekommen* einen wohldefinierten mathematischen Sinn bekommt. Wir treffen deshalb für unsere Zwecke die folgende

Vereinbarung:

Die Darstellung

$$d\mu(\phi) = c\mathcal{D}\phi \exp\{-\frac{1}{2}(\phi, K^{-1}\phi)\} \quad (179)$$

des normierten Maes μ sei gleichbedeutend mit

$$\int d\mu(\phi) \exp\{i\phi(f)\} = \exp\{-\frac{1}{2}(f, Kf)\} \quad (180)$$

falls (f, Kf) eine strikt positive quadratische Form ist.

Zurck zum freien Skalarfeld. Hier gilt $K^{-1} = -\Delta + m^2$, und $\frac{1}{2}(\phi, K^{-1}\phi)$ ist nichts anderes als das Wirkungsintegral eines klassischen (euklidischen) reellen Feldes $\phi(x)$. Eine partielle Integration bringt dieses Integral in die Standardform:

$$\frac{1}{2}(\phi, K^{-1}\phi) = \frac{1}{2} \int d^4x \left[\sum_{\alpha} \{\partial_{\alpha}\phi(x)\}^2 + m^2\phi(x)^2 \right] \quad (181)$$

Diese Beobachtung ist der Ausgangspunkt fr Verallgemeinerungen. Eine naheliegende Erweiterung besteht darin, selbstwechselwirkende Skalarfelder durch ein Wirkungsintegral der Form

$$W\{\phi\} = \int d^4x \left[\frac{1}{2} \sum_{\alpha} \{\partial_{\alpha}\phi(x)\}^2 + U(\phi(x)) \right] \quad (182)$$

einzufhren und versuchsweise die euklidischen n -Punktfunktionen dieser Theorie durch Funktionalintegrale der Form

$$\langle \Phi(x_1) \cdots \Phi(x_n) \rangle = \frac{\int \mathcal{D}\phi e^{-W\{\phi\}} \phi(x_1) \cdots \phi(x_n)}{\int \mathcal{D}\phi e^{-W(\phi)}} \quad (183)$$

auszudrcken. Hierbei ist $U : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$ ein "Potential", das Abweichungen von der parabelfrmigen Gestalt zult. Solche Abweichungen beschreiben die Art der Selbstwechselwirkung. Spezifische Modelle dieser Art sind:

- ϕ^4 -Modell $U(r) = \frac{1}{2}m^2r^2 + \lambda r^4 \quad (\lambda > 0)$
- Higgs-Modell $U(r) = -\frac{1}{2}\mu^2r^2 + \lambda r^4 \quad (\lambda > 0)$
- Sinus-Gordon-Modell $U(r) = \frac{1}{2}m^2r^2 + \lambda(\cos(\gamma r) - 1)$

Die Schwierigkeiten der Darstellung (183) liegen auf der Hand. Da die Funktionalintegrale nicht mehr Gaußisch sind, ist unklar, wie man sie definieren soll, und ungewiß, ob sie überhaupt definierbar sind. Der Umgang mit nicht-Gaußischen Funktionalintegralen ist kein leichtes Geschäft: die ganze Problematik der Renormierung aus der traditionellen Feldtheorie begegnet einem erneut. Eine elegante Umschiffung dieser Klippen ist bis heute nicht gelungen. Aber es gibt einen aussichtsreichen Versuch, nämlich: die konsequente Benutzung der *statistischen Interpretation* des euklidischen Feldes. Hierbei wird das Kontinuum E_4 durch ein endliches Gitter ersetzt. Zwei hintereinandergeschaltete Grenzprozesse (thermodynamischer Limes und Kontinuums-limes) führen zu den gewünschten n -Punktfunktionen der Feldtheorie. Die Rechnungen auf dem endlichen Gitter lassen sich im Prinzip mechanisch durch einen Computer ausführen. Vor die Aufgabe gestellt, Grenzprozesse auszuführen, versagt sogar die Spitzentechnologie.

5 Euklidische Feldtheorie: Die Gitterformulierung

Be wise, discretize!

Marc Kac

5.1 Die Gitterversion des Skalarfeldes

Für ein reelles Skalarfeld sei die euklidische Wirkung durch

$$W(\phi) = \int d^4x \left[\frac{1}{2} \sum_{\alpha} \{\partial_{\alpha} \phi(x)\}^2 + U(\phi(x)) \right] \quad (184)$$

gegeben. Eine Weise, zu wohldefinierten Ausdrücken für die n -Punktfunktionen zu gelangen, besteht darin, daß man den Raum E_4 durch ein periodisches Gitter $(\mathbb{Z}_N)^4$ ersetzt. Hierbei haben wir die Gitterkonstante gleich 1 gesetzt. Die Einführung einer dimensionsbehafteten Gitterkonstanten a läßt sich anschließend immer durch eine Skalentransformation erreichen. Mit $\mathbb{Z}_N = \mathbb{Z}/(N\mathbb{Z})$ bezeichnet man die Restklassengruppe, die entsteht, wenn man die ganzen Zahlen modulo N betrachtet: sie enthält genau N Elemente, die man sich gewöhnlich durch die Zahlen $0, 1, \dots, N-1$ repräsentiert denkt. Da $N = 0 \pmod N$ gilt, ist das Gitter periodisch mit der *gleichen* Periode N in allen vier Richtungen des Raumes (wir hätten auch vier verschiedene Perioden wählen können). Ein solches Gitter läßt sich nicht in den E_4 , sondern nur in den vierdimensionalen Torus $Tor_4 = (\mathbb{R} \pmod 1)^4$ einbetten. Man spricht deshalb von einem *toroidalen Gitter*. Der Grund, warum man ein allseitig periodisches Gitter wählt, ist bekanntlich seine Symmetrie unter diskreten Translationen. Auf diese Weise rettet man einen Teil der euklidischen Bewegungsgruppe des E_4 .

Das toroidale Gitter besitzt N^4 Gitterpunkte, die wir mit x, y usw. bezeichnen. Ein Gitterpunkt x besitzt Komponenten mit $x^i \in \{0, 1, \dots, N-1\}$ ($i = 1, \dots, 4$). Funktionen auf dem Gitter sind problemlos summierbar, z.B. existiert $\sum_x a^4 f(ax)$ immer und approximiert das Integral $\int d^4x f(x)$ für genügend großes N und hinreichend kleines a . Die Wirkung des euklidischen Skalarfeldes erhält auf dem Gitter die Form

$$W(\phi) = \sum_x \left[\frac{1}{2} \sum_i \{\partial_i \phi(x)\}^2 + U(\phi(x)) \right] \quad (185)$$

Wir haben uns nur darüber zu verständigen, was wir unter der partiellen Ableitung verstehen wollen. Unter den verschiedenen Optionen wählen wir den "Vorwärts"-Differenzenquotienten:

$$[\partial_i \phi](x) := \phi(x + e_i) - \phi(x) \quad (186)$$

Mit $x + e_i$ bezeichnen wir die Translation von x um eine Einheitslänge in Richtung der i -ten Achse.

Es ist wichtig, sich vor Augen zu halten, daß alle Größen in einer solchen Theorie *dimensionslos* sind: das gilt u.a. für den Ort x , die Masse m und das Feld $\Phi(x)$. Wegen $\hbar = c = 1$ genügt die Einführung einer einzigen Größe mit der Dimension einer Länge, um eine physikalisch interpretierbare Theorie zu erzeugen.

In der stochastischen Interpretation wäre das euklidische Feld $\Phi(x)$ auf dem Gitter eine Zufallsvariable mit Werten in \mathbb{R} , und $\phi(x)$ ist eine Variable, die für die möglichen "Pfade" (engl. *histories*) des Feldes steht. Ein solcher Pfad weist also jedem der N^4 Gitterpunkte eine reelle Zahl zu, d.h. der Pfadraum kann im Falle eines endlichen Gitters grundsätzlich mit \mathbb{R}^{N^4} identifiziert werden. Jedes Pfadintegral wird somit einem gewöhnlichen N^4 -dimensionalen Integral äquivalent. Das ist, für sich genommen, noch kein Grund zur Freude: selbst für bescheidene Gitter, z.B. für Gitter mit $N = 5$, wäre dies ein 625-dimensionales Integral. Jedoch *ein* Vorteil ist hervorzuheben. Wir sind nicht mehr genötigt, auf dem Gitter die Felder mit Testfunktionen zu glätten. Denn es gibt keinen Unterschied zwischen glatten und nicht-glatten Funktionen mehr. Auch der Begriff *differentierbar* verliert seinen Sinn. Die Formel

$$\langle \Phi(x_1) \cdots \Phi(x_n) \rangle = \frac{\int \mathcal{D}\phi e^{-W(\phi)} \phi(x_1) \cdots \phi(x_n)}{\int \mathcal{D}\phi e^{-W(\phi)}} \quad (187)$$

bereitet uns keine Schwierigkeiten. Denn das Lebesgue-Maß

$$\mathcal{D}\phi = \prod_x d\phi(x) \quad (188)$$

ist nun wohldefiniert, weil der Pfadraum endlichdimensional ist. Ein vergleichsweise harmloses Problem bleibt, weil unsicher ist, ob die Integrale in (187) konvergent sind. Hinreichend für die Konvergenz ist jedoch die **Stabilitätsbedingung**

Das Potential $U(r)$ in der euklidischen Wirkung (185) besitzt eine untere Schranke der Form

$$U(r) > -c + \mu^2 r^2 \quad (189)$$

mit $\mu^2 > 0$. Hierbei muß μ nicht die Masse des zu beschreibenden Feldes sein.

Eine ähnliche Bedingung benötigen wir für die Anwendung der Feynman-Kac-Formel. Die Bedingung (189) ist jedoch schärfer: das Potential muß

oberhalb einer Parabel liegen. Die Annahme $\mu^2 > 0$ ist notwendig wegen der Existenz von Impuls-Null-Moden auf dem Gitter.

Die Stabilitätsbedingung macht deutlich, daß wir etwa in der ϕ^4 -Theorie das Vorzeichen der Kopplungskonstanten λ nicht einfach umkehren können, ohne die Stabilität zu verlieren. Der Störungstheorie, auf die allein die konventionelle Feldtheorie fußt, ist ein solches Vorzeichen völlig gleichgültig. Man darf deshalb mit Recht behaupten, daß jede Aussage über ein feldtheoretisches Modell immer dann als *nicht-trivial* gelten kann, wenn in ihr das Vorzeichen der Kopplungskonstanten eine Rolle spielt²³.

Wie gewinnen wir die Feldtheorie auf dem Kontinuum? Dies soll in drei Stufen geschehen:

1. *Thermodynamischer Limes*. Wir lassen die Gitterperiode N gegen Unendlich streben und berechnen so die n -Punktfunktionen auf dem Gitter \mathbb{Z}^4 . Noch sind alle Größen dimensionslos.
2. *Skalentransformation*. Wir führen eine variable Gitterkonstante a ein mit der Dimension einer Länge (in der Größenordnung von 1 Fermi = 10^{-13} cm). Das Gitter \mathbb{Z}^4 wird durch $(a\mathbb{Z})^4$ ersetzt und das neue Gitter in den Raum E_4 eingebettet. Alle Konstanten der Theorie (Massen, Kopplungskonstanten etc.) sowie das Feld selbst werden einer Skalentransformation unterworfen, die diesen Größen die erforderliche Dimension gibt. Das Resultat ist eine a -abhängige Theorie.
3. *Kontinuums-limes*. Bei geeigneter Wahl der a -Abhängigkeit aller Größen existieren die n -Punktfunktionen im Limes $a \rightarrow \infty$. Dieser Vorgang ersetzt das Renormierungsverfahren der konventionellen Feldtheorie.

5.2 Der euklidische Propagator auf dem Gitter

5.2.1 Darstellung durch Fourier-Zerlegung

Die Translationssymmetrie des periodischen Gitters erlaubt die Einführung einer Fourier-Transformation für (komplexe) Funktionen $f(x)$. Impulsvariablen bezeichnen wir wie üblich mit p . Der Impulsraum ist wieder ein toroidales Gitter, das dem Ausgangsgitter weitgehend gleicht, mit dem Unterschied allerdings, daß die Gitterkonstante $\frac{2\pi}{N}$ ist: $p = \{p_1, \dots, p_4\} \in (\frac{2\pi}{N}\mathbb{Z}_N)^4$. Schreibt man $px = \sum_{k=1}^4 p_k x^k$, so bilden die ebenen Wellen

$$f_p(x) = N^{-2} e^{ipx} \tag{190}$$

²³Diese Aussage geht auf K.Symanzik zurück und wurde in der Vergangenheit zu wenig gewürdigt.

– wie man leicht nachweist – ein vollständiges Orthonormalsystem bezüglich des Skalarproduktes $(f, g) = \sum_x \overline{f(x)}g(x)$. Wir erinnern an den Gittergradienten und führen nun auch seinen adjungierten Operator ein:

$$\partial_k f(x) = f(x + e_k) - f(x) \quad (191)$$

$$\partial_k^* f(x) = f(x - e_k) - f(x) \quad (192)$$

Ist Δ der Laplace-Operator des Gitters, so können wir $-\Delta = \sum_{k=1}^4 \partial_k^* \partial_k$ schreiben. Beachten wir $pe_k = p_k$, so ergeben sich die Eigenwertgleichungen:

$$\partial_k f_p(x) = (e^{ip_k} - 1)f_p(x) \quad (193)$$

$$\partial_k^* f_p(x) = (e^{-ip_k} - 1)f_p(x) \quad (194)$$

Also $-\Delta f_p(x) = \sum_{k=1}^4 |e^{ip_k} - 1|^2 f_p(x)$. Indem wir

$$E_p = \sum_{k=1}^4 2(1 - \cos p_k) \quad (195)$$

setzen, können wir auch $-\Delta f_p(x) = E_p f_p(x)$ schreiben. Was sagt uns dieses Ergebnis?

Das Spektrum von $-\Delta$ auf dem Gitter ist rein diskret und fällt in das Intervall $[0, 16]$.

Da wir die Spektralzerlegung des Operators $-\Delta$ besitzen, können wir auch zugleich die Spektralzerlegung eines jeden Operators $F(-\Delta)$ angeben, wenn $F(t)$ eine beliebige komplexwertige Funktion von einer reellen Variablen t ist und das Intervall $[0, 16]$ im Definitionsbereich von F liegt:

$$F(-\Delta)f_p(x) = F(E_p)f_p(x) \quad (196)$$

Eine erste Anwendung besteht darin, daß wir $F(t) = \log(t + m^2)$ wählen und zur Ortsdarstellung zurückkehren:

$$\log(-\Delta + m^2)(x, y) = N^{-4} \sum_p e^{ip(x-y)} \log(E_p + m^2) \quad (197)$$

Aus dieser Formel berechnet man leicht

$$\text{Spur } \log(-\Delta + m^2) = \sum_x \log(-\Delta + m^2)(x, x) = \sum_p \log(E_p + m^2) \quad (198)$$

und erhält so Zugang zu dem Normierungsintegral

$$\begin{aligned} \int \mathcal{D}\phi \exp\left\{-\frac{1}{2}(\phi, (-\Delta + m^2)\phi)\right\} &= \left[\det\left(\frac{-\Delta + m^2}{2\pi}\right)\right]^{-1/2} \\ &= \exp\left\{-\frac{1}{2}\sum_p \log\frac{E_p + m^2}{2\pi}\right\} \end{aligned} \quad (199)$$

indem man von der Identität $\det = \exp \text{Spur} \log$ Gebrauch macht.

Eine weitere Anwendung besteht darin, daß wir $F(t) = (t + m^2)^{-1}$ wählen und zur Ortdarstellung zurückkehren. Auf diese Weise erhalten wir den euklidischen Propagator eines skalaren Teilchens:

$$\langle \Phi(x)\Phi(y) \rangle_N = S_N(x - y, m) = N^{-4} \sum_p \frac{e^{ip(x-y)}}{E_p + m^2} \quad (200)$$

Man beachte die charakteristische Abweichung von der Formel (3.12) aufgrund der Wahl eines Gitters.

Diese Zweipunktfunktion in einer allgemeinen Situation, d.h. in Anwesenheit von Wechselwirkungen, zu studieren, ist eine der wichtigsten Aufgaben der Simulation auf dem Computer. Selbstverständlich gilt dann nicht mehr die Darstellung (200) in voller Strenge, sondern nur noch für große Abstände $|x - y|$, wenn m die kleinste Masse aller Zustände mit den Quantenzahlen des Feldes Φ ist. Auf einem unendlich ausgedehnten Gitter erwarten wir ein exponentielles Abfallgesetz für die Zweipunktfunktion. Auf einem periodischen Gitter gibt es jedoch keine "großen" Abstände. Deshalb ist in allen konkreten Rechnungen (bei festem Gitter) eine Extrapolation der Art $|x - y| \rightarrow \infty$ zur Bestimmung der Masse m nicht möglich, und die Frage tritt auf: Was tritt an die Stelle des exponentiellen Abfalls?

Einen Hinweis kann die Formel (200) geben, jedoch ist sie noch zu kompliziert. Schreibt man für den Ort $x = \{\mathbf{x}, x^4\}$ und für den Impuls $p = \{\mathbf{p}, p_4\}$, so bewirkt eine Summation über \mathbf{x} eine Projektion auf Zustände mit $\mathbf{p} = 0$:

$$\sum_{\mathbf{x}} S_N(x, m) = N^{-1} \sum_{p_4} \frac{\exp\{ip_4 x^4\}}{m^2 + 2(1 - \cos p_4)} \quad (201)$$

Die so bestimmte Funktion läßt sich in der Tat in geschlossener Form berechnen.

Theorem

Ein modifizierter Massenparameter M sei durch $\sinh \frac{1}{2}M = \frac{1}{2}m$ eingeführt. Dann gilt für $0 \leq x^4 < N$:

$$\sum_{x^1, x^2, x^3} S_N(x, m) = C_N \cosh\{M(x^4 - N/2)\} \quad (202)$$

mit $C_N^{-1} = 2 \sinh M \sinh(MN/2)$.

Beweis. Wir setzen $f(\alpha) = [m^2 + 2(1 - \cos \alpha)]^{-1}$ und entwickeln:

$$f(\alpha) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} c_n e^{-in\alpha} \quad (203)$$

Die Koeffizienten bestimmen wir durch ein Fourier-Integral:

$$\begin{aligned} c_n &= \frac{1}{2\pi} \int_{-\pi}^{\pi} e^{in\alpha} f(\alpha) d\alpha \\ &= \frac{1}{2\pi} \int_0^{\pi} \frac{\cos n\alpha d\alpha}{a - \cos \alpha} \quad a = 1 + \frac{1}{2}m^2 > 1 \\ &= \frac{1}{2\sqrt{a^2 - 1}} (a - \sqrt{a^2 - 1})^{|n|} \end{aligned}$$

Das Resultat vereinfacht sich, wenn wir $a = \cosh M$ setzen. Dies ist $\sinh \frac{1}{2}M = \frac{1}{2}m$ äquivalent, und wir erhalten

$$c_n = \frac{e^{-M|n|}}{2 \sinh M} \quad (204)$$

Damit können wir schreiben:

$$\sum_{\mathbf{x}} S_N(x, m) = \frac{1}{N} \sum_{p_4} e^{ip_4 x^4} f(p_4) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} c_n \delta_N(x^4 - n)$$

mit

$$\delta_N(n) = \frac{1}{N} \sum_{k=0}^{N-1} e^{i2\pi kn/N} = \begin{cases} 1 & n = 0 \bmod N \\ 0 & n \neq 0 \bmod N \end{cases}$$

wobei wir $p_4 = 2\pi k/N$, $x^4 = n'$ gesetzt haben. Also

$$\sum_{n=-\infty}^{\infty} c_n \delta_N(n' - n) = \sum_{j=-\infty}^{\infty} c_{n'+jN}$$

Im Bereich $0 \leq n' < N$ gilt

$$|n' + jN| = \begin{cases} n' + jN & j \geq 0 \\ N - n' + kN & k \geq 0 \quad j + k + 1 = 0 \end{cases}$$

und somit

$$\sum_{j=-\infty}^{\infty} e^{-M|n'+jN|} = \frac{e^{-Mn'} + e^{-M(N-n')}}{1 - e^{-MN}} = \frac{\cosh\{M(n' - N/2)\}}{\sinh(MN/2)}$$

was den Beweis beendet.

Im Kontinuum zerfallen Korrelationen exponentiell mit dem Abstand (siehe (3.15)), und aus dem asymptotischen Verhalten bestimmt man die Masse des Teilchens. Auf einem toroidalen Gitter ist manches anders. Hier kann der maximale Abstand zweier Punkte auf der Zeitachse höchstens den Wert $N/2$ annehmen. Für diesen Wert ist erwartungsgemäß die Korrelation minimal, aber nicht Null. Im übrigen zeigt das eben bewiesene Theorem, daß an die Stelle des Exponentialgesetzes nun ein cosh-Gesetz tritt, wobei der darin auftretende Massenparameter M zwar mit dem im Propagator auftretenden Parameter m in einfacher Weise verbunden ist, jedoch nicht mit ihm übereinstimmt. Dieser Unterschied schwindet auch dann nicht, wenn wir N sehr groß wählen oder gar N nach Unendlich schicken. Erst die Einführung einer Gitterkonstanten a mit nachfolgenden Limes $a \rightarrow 0$ führt auf die gewünschte Identität $M = m$, wie man an der für alle a gültigen Beziehung $\sinh(\frac{1}{2}aM) = \frac{1}{2}am$ erkennt.

Am Beispiel des Zerfalls von Korrelationen läßt sich deutlich machen, wo die Grenzen der Zuverlässigkeit von Computersimulation auf dem Gitter liegen. Für den Wert $M = 0.1$ haben wir in einem Diagramm bei Gittergrößen zwischen 10^4 und 100^4 die räumlich gemittelte Zweipunktfunktion im Bereich $0 < x^4 < 10$ aufgetragen und dabei so normiert, daß sie stets bei $x^4 = 0$ den

Wert 1 annimmt.

Der Abstand 10 zweier Punkte auf dem Gitter entspricht der Comptonwellenlänge des Teilchens (in Einheiten der Gitterkonstanten). Um zu erreichen, daß die Funktion für gegebenes N im genannten Bereich sich nicht wesentlich von der Grenzfunktion unterscheidet, muß in diesem Beispiel mindestens der Wert $N = 100$ gewählt werden. Dies entspricht einer linearen Ausdehnung des Gitters von mindestens 10 Comptonwellenlängen. Hat man eine Längenskala durch Einführung von a definiert, so muß $aM \ll 1$ erfüllt sein, damit der Unterschied zwischen den Massen M und m nicht ins Gewicht fällt. Dies bedeutet, daß die Gitterkonstante a auf jeden Fall kleiner als $0,1 \times$ Comptonwellenlänge zu wählen ist.

Falls die Annahme eines Kontinuums eine mathematische Fiktion war und der physikalische Raum im Kleinen eine noch unbekannte körnige Struktur besitzt (möglicherweise als Konsequenz der Quantengravitation), die auf die Einführung einer kleinsten "Elementarlänge" (die Planck-Länge?) hinausläuft, so gelangen wir solange nicht in Widerspruch zur Kontinuumsfeldtheorie, wie wir sicher sein können, daß Elementarteilchen Comptonwellenlängen besitzen, die sämtlich groß gegenüber der Elementarlänge sind. Von diesem Standpunkt aus betrachtet, erscheint es nicht gesichert, daß Rechnungen, die von einem Kontinuum ausgehen, die Wirklichkeit besser beschreiben verglichen mit Rechnungen, die von der Annahme einer endlichen Gitterkonstanten a ausgehen.

5.2.2 Darstellung durch Zufallswege auf dem Gitter

Das Studium des Zerfalls von Korrelationen und das Auffinden von “scharfen” Korrelationsungleichungen gehört zu den wichtigsten Aufgaben der Feldtheorie wie auch der statistischen Mechanik. Aus diesem Grund wollen wir hier eine weitere Technik erproben, die Darstellung nämlich durch Pfade auf dem Gitter. Ausgangspunkt ist die folgende Beschreibung des Laplace-Operators:

$$\Delta = \sum_{i=1}^4 (S_i + S_i^{-1} - 2) \quad (205)$$

$$[S_i f]_{x'} = f_{x'-e_i} = \sum_x (S_i)_{x'x} f_x \quad (206)$$

Anschaulich: S_i bedeutet *Schritt in die i -te Richtung*, und S_i^{-1} bezeichnet *Schritt in die entgegengesetzte Richtung*. Deutet man etwa f als Verteilung eines fiktiven Teilchens auf dem Gitter, so wäre $S_i f$ die verschobene Verteilung.

Durch eine Folge $\pm e_{i_1}, \pm e_{i_2}, \dots, \pm e_{i_n}$ von Verschiebungsvektoren wird genau ein Weg ω der Länge $|\omega| = n$ auf dem Gitter beschrieben, der von einem vorgegebenen Anfangspunkt x zum Endpunkt

$$x' = (\dots((x \pm e_{i_1}) \pm e_{i_2}) \pm \dots \pm e_{i_n})$$

führt. Da die Translationen auf dem Gitter eine kommutative Gruppe bilden, können wir natürlich auf die Klammern auch verzichten und die Verschiebungsvektoren permutieren. Hierdurch entstehen neue Wege, die von x nach x' führen. Alle so erzeugten Wege bilden eine Äquivalenzklasse, die wir mit $[\omega]$ bezeichnen. Dem einzelnen Pfad ω ist die Operatorfolge $S_{i_n}^{(-1)}, \dots, S_{i_2}^{(-1)}, S_{i_1}^{(-1)}$ zugeordnet, wobei wir S_i^{-1} schreiben, sobald der Verschiebungsvektor e_i ein negatives Vorzeichen hat. Das Produkt $S_\omega = S_{i_n}^{(-1)} \dots S_{i_2}^{(-1)} S_{i_1}^{(-1)}$ hingegen ist eine Klassenfunktion: Der Operator S_ω hängt nur von $[\omega]$ ab. Er verschiebt eine gegebene Anfangsverteilung auf dem Gitter, und seine Matrixelemente sind

$$(S_\omega)_{x'x} = \begin{cases} 1 & \omega : x \rightarrow x' \\ 0 & \text{sonst} \end{cases}$$

Wesentlich ist jetzt die folgende Beobachtung: die Zahl der Wege ω gegebener Länge n , die vom Punkt x zum Punkt x' führen, ist rein algebraisch durch ein Matrixelement ausdrückbar:

$$\sum_{\substack{\omega: x \rightarrow x' \\ |\omega|=n}} 1 = \sum_{\substack{\omega: x \rightarrow x' \\ |\omega|=n}} (S_{[\omega]})_{x'x} = (\sum_i (S_i + S_i^{-1}))_{x'x}^n \quad (207)$$

Jetzt entwickeln wir den Propagator, der hier als Matrix aufzufassen ist:

$$(-\Delta + m^2)_{x'x}^{-1} = \sum_{n=0}^{\infty} (m^2 + 8)^{-n-1} (\sum_i (S_i + S_i^{-1}))_{x'x}^n \quad (208)$$

$$= \sum_{\omega: x \rightarrow x'} \lambda^{|\omega|+1} \quad (209)$$

wobei $\lambda = (m^2 + 8)^{-1}$ gesetzt wurde. Wir besitzen somit eine Darstellung, die die Korrelation zwischen x und x' ausdrückt durch eine Summe über *alle* Pfade, die von x nach x' führen, wobei lange Pfade ein exponentiell abnehmendes Gewicht bekommen (auch auf einem endlichen Gitter können die Pfade beliebig lang werden, wenn Gitterpunkte mehrfach besucht werden). Die Summe beginnt mit dem kürzesten Pfad: i.allg. ist ein solcher Pfad auf dem Gitter nicht eindeutig. Wir haben zwei Fragen zu klären:

1. Konvergiert die Entwicklung (209)?
2. Wie verhält sich der Propagator, wenn die Distanz²⁴ $|x' - x| = \min_{\omega: x \rightarrow x'} |\omega|$ groß wird?

Die Antwort auf beide Fragen finden wir durch die einfache Feststellung, daß die Anzahl aller Pfade $N(n)$ der Länge n , für die nur der Anfangspunkt, nicht aber der Endpunkt festgelegt wurde, die Beziehung $N(n) = 8^n$ erfüllt (allgemein $(2d)^n$ in d Dimensionen). Deshalb finden wir ein konvergente majorisierende Reihe

$$0 < (-\Delta + m^2)_{x'x}^{-1} < \sum_{n=|x'-x|}^{\infty} 8^n \lambda^{n+1} = m^{-2} e^{-\mu|x'-x|} \quad (210)$$

mit einem neuen Massenparameter $\mu = \log(1 + m^2/8)$, sobald die Bedingung $m^2 > 0$ erfüllt ist. Die gewonnene Abschätzung ist bei weitem nicht so präzise wie der Inhalt des Theorems im vorigen Abschnitt. Zwar haben wir mittels der Pfadsumme den exponentiellen Zerfall der Korrelationen nachgewiesen, jedoch der gefundene Wert für μ befriedigt nicht: er weicht von M (zu berechnen aus $\sinh \frac{1}{2}M = \frac{1}{2}m$) deutlich ab, und zwar umso mehr, je größer m ist. Die Ungleichung $M > \mu$ ist leicht zu demonstrieren.

Die Methode der Zufallswege auf dem Gitter ist verallgemeinerungsfähig. Im Prinzip ist es möglich, jede beliebige n -Punktfunktion eines selbstwechselwirkenden Skalarfeldes als Pfadsumme darzustellen. Diese Art der Beschreibung wurde 1969 von K.Symanzik in die Feldtheorie eingeführt und spielte eine entscheidende Rolle in den Beweisen von M.Aizenman und J.Fröhlich, die Trivialität der ϕ^4 -Theorie in Dimensionen $d > 4$ betreffend.

²⁴Offensichtlich handelt es sich hierbei um die sog. Taxifahrer-Metrik.

5.3 Das Variationsprinzip

Wir verfolgen im Augenblick zwei Ziele. Zu einen wollen wir den Zusammenhang der euklidischen Formulierung der Feldtheorie mit der statistischen Mechanik deutlich machen, zum anderen wollen wir die Abhängigkeit von der Planckschen Konstanten hervorheben, um so den klassischen Grenzfall $\hbar = 0$ besser zu erkennen. Wir erläutern zunächst den Begriff der Entropie in einem möglichst einfachen mathematischen Rahmen.

5.4 Modelle mit diskretem Phasenraum

Anstelle der Feldtheorie studieren wir eine statistische Theorie mit endlich vielen Zuständen, d.h. wir ersetzen den Phasenraum Ω durch eine Menge von n Elementen. Das Ising-Modell ist von dieser Art: ist d die Dimension und N die Gitterperiode, so gilt dort $n = 2^{N^d}$. Aber auch von der Feldtheorie ausgehend, lassen sich solche Modelle konstruieren, etwa dadurch, daß man den kontinuierlichen Phasenraum Ω in Zellen Ω_i einteilt (engl. *coarse graining*). An die Stelle von Maßen $d\mu(\phi)$ treten Verteilungen $p = (p_1, \dots, p_n)$ mit $0 \leq p_i \leq 1$ und $\sum_i p_i = 1$. Jeder Verteilung mit n Freiheitsgraden ist vermöge der Formel

$$S(p) = - \sum_{i=1}^n p_i \log p_i \quad (211)$$

eine Zahl zugeordnet, die man die *Entropie der Verteilung* nennt. Hierbei setzt man $p_i \log p_i = 0$ für $p_i = 0$. In der Thermodynamik wird $kS(p)$ als die Entropie erklärt, wobei k die Boltzmann-Konstante ist. Diesem Brauch wollen wir hier mit Blick auf eine möglichst breite Anwendbarkeit nicht folgen.

Es gilt $S(p) \geq 0$. Das Maximum der Entropie ist abhängig von der Zahl der Zustände und wird nur von der Gleichverteilung erreicht:

$$\sup_p S(p) = S\left(\frac{1}{n}, \dots, \frac{1}{n}\right) = \log n$$

Die Verteilung p soll mit einer zweiten Verteilung $\alpha = (\alpha_1, \dots, \alpha_n)$ verglichen werden. Als *Entropie von p relativ zu α* bezeichnet man die Zahl

$$S(p|\alpha) = - \sum_i p_i \log(p_i/\alpha_i) \quad (212)$$

wobei $-\infty$ ein erlaubter Wert ist. Im Grunde ist die Definition (211) von $S(p)$ nur ein Spezialfall von (212), ein Fall der eintritt, wenn α die Gleichverteilung ist:

$$S(p | \frac{1}{n}, \dots, \frac{1}{n}) = S(p) - \log n \quad (213)$$

Bis auf den irrelevanten konstanten Term $-\log n$ stimmen hier beide Entropiebegriffe überein.

Lemma

Es gilt stets $S(p|\alpha) \leq 0$ und $S(p|\alpha) = 0$ genau dann, wenn $\alpha_i = p_i$ für alle i erfüllt ist.

Beweis. Für alle i sei $\alpha_i > 0$. Die Funktion $f(u) = u \log u$ ist konvex für $u \geq 0$; denn $f''(u) = u^{-1} > 0$. Deshalb:

$$f\left(\sum_i \alpha_i u_i\right) \leq \sum_i \alpha_i f(u_i) \quad (214)$$

Hierin setzen wir $u_i = p_i/\alpha_i$, so daß $\sum_i \alpha_i u_i = \sum_i p_i = 1$. Wegen $f(1) = 0$ folgt

$$0 \leq \sum_i p_i \log(p_i/\alpha_i)$$

wie gewünscht. Da die Funktion $f(u)$ strikt konvex ist ($f''(u) > 0$), gilt das Gleichheitszeichen in (214) genau dann, wenn alle u_i gleich sind: $u_i = q$, also $p_i = q\alpha_i$ und damit $1 = \sum_i p_i = q \sum_i \alpha_i = q$, d.h. $\alpha_i = p_i$, und das Lemma ist bewiesen.

Es seien w_1, \dots, w_n irgendwelche reelle Zahlen. Ihnen ist immer eine Verteilung α zugeordnet, indem man setzt:

$$\alpha_i = z^{-1} e^{-w_i} \quad z = \sum_i e^{-w_i} \quad (215)$$

In diesem Fall erhält man die Identität

$$\sum_i p_i w_i - S(p) = -S(p|\alpha) - \log z \quad (216)$$

und wir erkennen, daß das eben bewiesene Lemma zu der folgenden Aussage äquivalent ist:

Variationsprinzip

Es gilt

$$\inf_p \left\{ \sum_i p_i w_i - S(p) \right\} = -\log z \quad (217)$$

wobei das Infimum für nur für die Verteilung $p = \alpha$ erreicht wird; α und z sind durch (215) gegeben.)

In allen Anwendungen sind die Zahlen w_i Meßwerte einer Observablen W im Zustand i (der Energie in Einheiten von kT , der Wirkung in Einheiten von \hbar etc.).

Was geschieht, wenn in (217) die Entropie weggelassen wird und das Problem

$$\sum_i p_i w_i = \text{Minimum} \quad 0 \leq p_i \leq 1, \quad \sum_i p_i = 1 \quad (218)$$

zu lösen ist? Offensichtlich gilt $\min \sum_i p_i w_i = \min_i w_i$, und existiert unter den Zahlen w_i genau eine, die minimal ist, sagen wir w_{i_0} , so ist die Lösung eindeutig:

$$p_i = \begin{cases} 1 & i = i_0 \\ 0 & \text{sonst} \end{cases} \quad (219)$$

Dies wollen wir im Auge behalten; denn (218) entspricht dem klassischen Grenzfall, dem Übergang nämlich von der stochastischen zur deterministischen Beschreibung.

5.5 Modelle mit kontinuierlichem Phasenraum

Auch in der Gitterformulierung geht die Feldtheorie von einem kontinuierlichen Phasenraum aus. Selbst bei Beschränkung auf einen einzigen Gitterpunkt wäre der Phasenraum eines n -komponentigen Feldes mit \mathbb{R}^n zu identifizieren.

Der Einfachheit halber betrachten wir ein einzelnes Skalarfeld, das etwa der Beschreibung eines Higgs-Teilchens dienen könnte. Wir setzen voraus, daß die euklidische Wirkung die Form (185) hat und daß $W(\phi)$ nicht \hbar enthält. Das entspricht der früher (s. Vorlesung QFT I) vertretenen Auffassung, daß die Wirkung eine rein *klassische* Größe ist, die durch Anwendung des Korrespondenzprinzips in die Quantenfeldtheorie übernommen wird. Ebenso ist der Phasenraum Ω , dem ϕ angehört, eine rein klassische Konstruktion. Die n -Punktfunktionen berechnen wir als Mittelwerte von $\phi(x_1) \cdots \phi(x_n)$ bezüglich des normierten Maßes (auf Ω)

$$d\mu(\phi) = \mathcal{D}\phi Z^{-1} \exp\{-\hbar^{-1}W(\phi)\} \quad (220)$$

$$Z = \int \mathcal{D}\phi \exp\{-\hbar^{-1}W(\phi)\} \quad (221)$$

Auf dem Gitter ist \hbar – wie alle anderen Größen – dimensionslos. Diese Variable ist sozusagen ein “Platzhalter” für die Plancksche Konstante. Sie dient dazu, klassische Effekte von Quanteneffekten verschiedener Ordnung zu unterscheiden.

Folgen wir dem Sprachgebrauch der statistischen Mechanik, so ist Z eine Zustandssumme und $d\mu(\phi)$ ein Gibbs-Maß. Man weiß, daß Gibbs-Maße Lösungen eines Variationsproblems sind. Die diskrete Version dieses Problems haben wir im vorigen Abschnitt kennengelernt. Das allgemeine Konzept verlangt die Einführung der Entropie eines W-Maßes. Die hier vorgestellte Definition geht auf Boltzmann, Gibbs und Shannon zurück.

Definition der Entropie

Für ein W-Maß μ auf Ω mit $d\mu(\phi) = \mathcal{D}\phi p(\phi)$ und $p(\phi) \geq 0$ ist die Entropie durch

$$S(\mu) = - \int \mathcal{D}\phi p(\phi) \log p(\phi) \quad (222)$$

gegeben.

Wie früher setzt man auch hier $r \log r = 0$ für $r = 0$. Es existiert kein Maximum für $S(\mu)$: es entspräche einer Gleichverteilung von $\phi(x)$ auf \mathbb{R} , die durch kein W-Maß repräsentiert ist. Der Wertebereich von $S(\cdot)$ ist die gesamte reelle Achse.

Um zwei W-Maße μ und ν miteinander vergleichen zu können, führen wir die *relative Entropie* ein:

$$S(\mu|\nu) = - \int d\mu(\phi) \log g(\phi) \quad d\mu(\phi) = d\nu(\phi) g(\phi) \quad (223)$$

Hierfür schreibt man auch $S(\mu|\nu) = - \int d\mu \log(d\mu/d\nu)$. Wir setzen $g(\phi) > 0$ voraus.

Lemma

Es gilt allgemein $S(\mu|\nu) \leq 0$ und $S(\mu|\nu) = 0$ nur für $\mu \doteq \nu$ (Übereinstimmung der Maße bis auf eine Menge vom Maße Null).

Beweis. Die Funktion $f(u) = u \log u$ ist konvex für $u \geq 0$. Deshalb gilt die Ungleichung von Jensen

$$f\left(\int d\nu(\phi) g(\phi)\right) \leq \int d\nu(\phi) f(g(\phi))$$

für jede Funktion $g : \Omega \rightarrow \mathbb{R}_+$. Setzen wir $g = d\mu/d\nu$, so folgt $\int d\nu g = 1$, und wegen $f(1) = 0$ haben wir somit

$$0 \leq \int d\mu(\phi) \log g(\phi)$$

wie gewünscht. Da f strikt konvex ist, gilt das Gleichheitszeichen nur, falls $g(\phi) = q = \textit{konstant}$ ist (fast überall auf Ω , also abweichend von q höchstens auf einer Menge vom μ -Maß Null). Gilt aber $d\mu(\phi) \doteq q d\nu(\phi)$, so folgt $1 = \int d\mu(\phi) = q \int d\nu(\phi) = q$ und deshalb $\mu \doteq \nu$.

Nun sei $d\mu(\phi) = \mathcal{D}\phi p(\phi)$ und

$$d\nu(\phi) = \mathcal{D}\phi Z^{-1} \exp\{-\hbar^{-1}W(\phi)\} \quad (224)$$

$$Z = \int \mathcal{D}\phi \exp\{-\hbar^{-1}W(\phi)\} \quad (225)$$

ein Gibbs-Maß. Dann finden wir die Identität

$$\int d\mu(\phi) W(\phi) - \hbar S(\mu) = -\hbar S(\mu|\nu) - \hbar Z \quad (226)$$

Die hierin auftretende Größe

$$\langle \mu, W \rangle = \int d\mu(\phi) W(\phi) \quad (227)$$

nennen wir die *mittlere Wirkung*. Das eben bewiesene Lemma ist mit der folgenden Aussage äquivalent.

Variationsprinzip

Es gilt

$$\inf_{\mu} \{\langle \mu, W \rangle - \hbar S(\mu)\} = -\hbar Z \quad (228)$$

Das Infimum wird nur für $\mu \doteq \nu$ erreicht, wobei ν und Z durch die Formeln (224) und (225) gegeben sind.

In der Menge der W -Maße ist jedes Gibbs-Maß also dadurch ausgezeichnet, daß es ein Variationsproblem löst.

Was geschieht im Grenzfall $\hbar = 0$? Hier geht die Quantenfeldtheorie in die ihr zugeordnete klassische Feldtheorie über, weil das Variationsproblem (228) in das *Hamiltonsches Prinzip der kleinsten Wirkung* übergeht:

$$\langle \mu, W \rangle = \text{Minimum} \quad (229)$$

Dieses wird dadurch gelöst, daß wir – genau so, wie in (219) geschehen – für μ ein Dirac-Maß wählen, das auf dem Minimum der Wirkung konzentriert ist. Ist ϕ_0 die Stelle des Minimums, so gilt:

$$\langle \mu, W \rangle = W(\phi_0) = \min_{\phi \in \Omega} W(\phi) \quad (230)$$

Ist ϕ_0 eindeutig, und nur unter dieser Bedingung, können wir den klassischen Limes der Quantenfeldtheorie sofort angeben:

$$\lim_{\hbar \rightarrow 0} \langle \Phi(x_1) \dots \Phi(x_n) \rangle = \phi_0(x_1) \dots \phi_0(x_n) \quad (231)$$

Das Minimum der euklidischen Wirkung findet man durch Lösen der sich daraus ergebenden Euler-Lagrange-Gleichungen. Dies sind die euklidischen Feldgleichungen der Theorie²⁵ (auf dem Gitter sind dies Differenzgleichungen). Die Existenz des Minimums wird durch die Stabilitätsbedingung garantiert: Im Phasenraum Ω existiert in jedem Fall ein Element ϕ_0 , das als der *klassische* Pfad des Feldes erscheint. Durch den Effekt der spontanen Symmetriebrechung könnte es jedoch passieren, daß nicht nur eine, sondern gleich mehrere klassische Lösungen (eventuell ein Kontinuum von Lösungen) die Wirkung minimieren. In in einem solchen Fall ist das klassische Problem nicht eindeutig lösbar, und der Grenzfall $\hbar \rightarrow 0$ der Quantenfeldtheorie verlangt eine sorgfältigere Diskussion.

Theoretisch ist es möglich, von der Situation $\hbar = 0$ auszugehen. Wird der Parameter \hbar eingeschaltet, so beginnt das Quantenfeld um die klassische Lösung zu fluktuieren als Folge des Entropieterms in (228). Aus dieser Sicht ist es die Entropie, die das Quantenfeld zu einer Zufallsvariablen werden läßt. Das Gibbs-Maß ist in jedem Fall eindeutig, solange das Gitter endlich ist. Im thermodynamischen Limes ($N \rightarrow \infty$) hingegen kann u.U. diese Eindeutigkeit wieder verlorengehen, nämlich dann, wenn ein Phasenübergang existiert und wir uns in einer Phase mit mehreren Gleichgewichtszuständen befinden. Dies wird i.allg. auch durch eine spontane Symmetriebrechung begleitet sein. Quantenfluktuationen wirken dem entgegen: Je größer \hbar , umso geringer die Chance für eine spontane Symmetriebrechung.

In der statistischen Mechanik begegnet man einem Variationsprinzip, das seiner Struktur nach dem oben formulierten Prinzip völlig gleicht: Sei nämlich U die *innere Energie* eines Vielteilchensystems, S seine Entropie, beide Größen abhängig von dem Zustand, und befinde sich das System im Kontakt mit einem Wärmebad bei der Temperatur T , so wird ein Gleichgewicht genau dann erreicht, wenn der Ausdruck $U - TS$ seinen Minimalwert annimmt. Dieser Wert wird die *freie Energie* F (auch Helmholtz-Energie) des Systems bei der Temperatur T genannt. Der Gleichgewichtszustand, für den das Minimum angenommen wird, ist das *kanonische Ensemble*. Im Gleichge-

²⁵In der euklidischen Theorie sucht man das Minimum, in der Minkowski-Theorie hingegen allgemeiner die stationären Punkte der Wirkung. Dies ist ein wichtiger Unterschied und ist darauf zurückzuführen, daß elliptische Differentialgleichungen (der euklidische Fall) einem Minimum, hyperbolische Differentialgleichungen (der Minkowski-Fall) stationären Punkten der Wirkung entsprechen.

wicht hat man also die Beziehung $F = U - TS$, die in der Thermodynamik der Gase und Flüssigkeiten eine wichtige Rolle spielt.

In der Quantenfeldtheorie tritt an die Stelle der inneren Energie U die mittlere Wirkung $\langle \mu, W \rangle$ und an die Stelle der Temperatur die Plancksche Konstante. Obwohl sie von Natur aus einen festen dimensionsbehafteten Wert besitzt, kann es u.U. sinnvoll sein, sie auf dem Gitter wie eine variable dimensionslose Größe zu behandeln. Hochtemperaturentwicklungen der statistischen Mechanik entsprechen im Rahmen der Feldtheorie Reihenentwicklungen nach Potenzen von $1/\hbar$, Niedertemperaturentwicklungen entsprechen Reihen in \hbar^n (engl. *loop expansion*).

Bei voller Anwendung thermodynamischer Prinzipien auf die Feldtheorie werden wir u.a. auch auf die "freie Energie" eines Feldes geführt:

$$F = \inf_{\mu} [\langle \mu, W \rangle - \hbar S(\mu)] = -\hbar \log Z \quad (232)$$

Aus der statistischen Mechanik ist bekannt, daß es sich hierbei um eine *extensive* Größe handelt. Mit wachsendem Gitter – das heißt für $N \rightarrow \infty$ – strebt $N^{-4}F$, die freie Energie pro Gitterplatz, einem Limes f zu.

Für ein freies Skalarfeld der Masse m finden wir durch Anwendung der Formel (199) für die Gitterperiode N :

$$F = \frac{\hbar}{2} \sum_p \log \frac{E_p + m^2}{2\pi\hbar} \quad (233)$$

$$E_p = \sum_{k=1}^4 2(1 - \cos p_k) \quad p \in \left(\frac{2\pi}{N}\mathbb{Z}_N\right)^4$$

Wir wählten eine Darstellung, bei der die Impulskomponenten p_k stets in das Intervall $[0, 2\pi]$ fallen. Die Periodizität der Winkelfunktionen ausnutzen, können wir jedoch auch eine Darstellung wählen, bei der die Werte von p_k im Intervall $[-\pi, \pi]$ liegen. Wir kommen so zu dem Begriff der Brioullin-Zone $B_4 = [-\pi, \pi]^4$. Mit wachsendem N wird die Brioullin-Zone dichter und dichter mit erlaubten Impulswerten gefüllt, so daß man schließlich $d^4p = \left(\frac{2\pi}{N}\right)^4$ setzen kann und zu einem Integral gelangt:

$$f = \lim_{N \rightarrow \infty} N^{-4}F = \frac{\hbar/2}{(2\pi)^4} \int_{B_4} d^4p \log \frac{E_p + m^2}{2\pi\hbar} \quad (234)$$

5.6 Die effektive Wirkung

Jedes W-Maß μ auf dem Phasenraum Ω führt zu einem Erwartungswert

$$\langle \Phi(x) \rangle = \langle \mu, \Phi(x) \rangle = \int d\mu(\phi) \phi(x)$$

des Feldes, und Mittelwerte dieser Art sind selbst wieder Elemente von Ω ; wir schreiben kurz $\langle \mu, \Phi \rangle = \phi'$ für ein solches Element. Mehr noch ist richtig, nämlich jedes $\phi' \in \Omega$ ist auf diese Weise erhältlich, etwa dadurch, daß man ein Dirac-Maß μ wählt, das auf ϕ' konzentriert ist: $d\mu(\phi) = \mathcal{D}\phi \delta(\phi - \phi')$. Ist speziell μ das Gibbs-Maß in bezug auf eine Wirkung W , so ist man berechtigt, $\langle \mu, \Phi \rangle = \phi$ als ein *klassisches Feld* aufzufassen, das dem Quantenfeld Φ zugeordnet ist, genauso wie etwa ein klassisches Maxwell-Feld als Erwartungswert des Operatorfeldes der QED erscheint. Sind die Feldgleichungen linear, so werden sie sowohl von dem Operatorfeld als auch von seinem Erwartungswert erfüllt. Bei wechselwirkenden Feldern ist dies nicht mehr der Fall.

Eine ähnliche Situation liegt bereits in der Quantenmechanik vor, wo die Erwartungswerte von Ort und Impuls als die klassischen Größen der Theorie verstanden werden, und man lernt dort, daß die Erwartungswerte – den kräftefreien Fall ausgenommen – *nicht den gleichen Bewegungsgleichungen* gehorchen, wie die entsprechenden Operatoren im Heisenbergbild. Zur Demonstration betrachten wir ein einfaches Beispiel, bei dem der Hamilton-Operator die Gestalt

$$H(P, Q) = \frac{1}{2m}P^2 + V(Q) . \quad (235)$$

hat. Es sei $Q(t)$ der zeitabhängige Ortsoperator im Heisenberg-Bild und $K = -\text{grad } V$ die Kraft. Die Bewegungsgleichung $m\dot{Q} = K(Q)$ führt *nicht* auf $m\ddot{q} = K(q)$ für den Erwartungswert²⁶ $q(t) = \langle Q(t) \rangle$. Die Diskrepanz kommt dadurch zustande, daß i.allg.

$$\langle K(Q) \rangle \neq K(\langle Q \rangle) \quad (236)$$

gilt, konstante Kräfte und den harmonischen Oszillator ausgenommen. Nun ist es vorstellbar, daß Erwartungswerte auch einer Bewegungsgleichung genügen, daß in unserem Fall etwa die Differentialgleichung

$$\frac{d}{dt} \left(\frac{\partial L_{\text{eff}}}{\partial \dot{q}} \right) - \frac{\partial L_{\text{eff}}}{\partial q} = 0 \quad (237)$$

erfüllt ist für eine geeignete Wahl von $L_{\text{eff}}(\dot{q}, q)$. Dann würde man L_{eff} die *effektive* Lagrange-Funktion nennen und wüßte: Lösungen von (237) machen die effektive Wirkung

$$W_{\text{eff}} = \int dt L_{\text{eff}}(\dot{q}(t), q(t)) \quad (238)$$

²⁶Gemeint ist der Erwartungswert bezüglich eines Zustandes im Heisenberg-Bild. Bei Benutzung dieses Bildes sind Zustände grundsätzlich zeitunabhängig.

stationär. Für den harmonischen Oszillator gilt $L_{\text{eff}}(\dot{q}, q) = L(\dot{q}, q)$. Im allgemeinen muß jedoch damit gerechnet werden, daß L_{eff} ganz wesentlich von L abweicht und zudem noch von dem gewählten Zustand abhängig ist. Die Abhängigkeit von dem Zustand macht schließlich, daß das Konzept der effektiven Wirkung in der Quantenmechanik nur von marginalem Interesse ist. Die Feldtheorie hingegen besitzt einen ausgezeichneten Zustand, das *Vakuum*, oder euklidisch gesprochen, das *Gibbs-Maß zur Wirkung W* .

In der euklidischen Feldtheorie ist die Konstruktion einer effektiven Wirkung gleichbedeutend mit der Beantwortung der Frage: *Welcher Feldgleichung genügt das klassische Feld $\phi = \langle \mu, \Phi \rangle$, wenn μ das Gibbs-Maß einer Wirkung W ist?* Die Existenz einer effektiven Wirkung W_{eff} ist leicht zu demonstrieren, wenn man nur beachtet, daß das Problem $\langle \mu, W \rangle - \hbar S(\mu) = \text{Minimum}$ in Stufen lösbar ist:

1. Für alle $\phi \in \Omega$ sucht man zunächst das eingeschränkte Minimum

$$W_{\text{eff}}\{\phi\} = \inf_{\mu} \{ \langle \mu, W \rangle - \hbar S(\mu) \mid \langle \mu, \Phi \rangle = \phi \} \quad (239)$$

2. Anschließend löst man das Problem $W_{\text{eff}}\{\phi\} = \text{Minimum}$. Durch die Minimumssuche in Ω wird die Beschränkung $\langle \mu, \Phi \rangle = \phi$ in (239) wieder aufgehoben.

Das Minimum von $W_{\text{eff}}\{\phi\}$ ist die freie Energie F . In dem Augenblick, wo ϕ die effektive Wirkung minimiert, löst μ das Problem $\langle \mu, W \rangle - \hbar S(\mu) = \text{Minimum}$ unter der Beschränkung $\langle \mu, \Phi \rangle = \phi$.

Auch in der statistischen Mechanik werden effektive Wirkungen und die ihnen entsprechenden Feldgleichungen eingeführt. Von dieser Art sind etwa die Ginsburg-Landau-Gleichungen in der Theorie der Supraleitung. Wir werden die GL-Gleichungen im Abschnitt 4.6 vorstellen. Was wir nun für die euklidische Feldtheorie skizzieren, ist gewissermaßen eine Verallgemeinerung der Ideen, die zur Ginsburg-Landau-Theorie führten.

Die effektive Wirkung war das Resultat einer Extremalaufgabe mit Nebenbedingung. Probleme dieser Art lassen sich mit der *Methode der Lagrangeschen Multiplikatoren* behandeln. Für jeden Gitterpunkt x führen wir einen reellen Multiplikator $j(x)$ ein und studieren anstelle der ursprünglichen Extremalaufgabe nun das Problem

$$\langle \mu, W \rangle - \hbar S(\mu) - \sum_x j(x) \langle \mu, \Phi(x) \rangle = \text{Minimum} \quad (240)$$

(j fest, μ variabel). Da dieses Variationsproblem aber wieder die vertraute Gestalt (228) besitzt – lediglich $W\{\phi\}$ ist durch $W\{\phi\} - \sum_x j(x)\phi(x)$ ersetzt

worden –, können wir die Lösung sofort angeben:

$$d\mu_j(\phi) = \mathcal{D}\phi Z\{j\}^{-1} \exp \hbar^{-1}[\sum_x j(x)\phi(x) - W\{\phi\}] \quad (241)$$

$$Z\{j\} = \int \mathcal{D}\phi \exp \hbar^{-1}[\sum_x j(x)\phi(x) - W\{\phi\}] \quad (242)$$

$$\text{Minimum} = -\hbar \log Z\{j\} \quad (243)$$

Es handelt sich offenbar bei μ_j wieder um ein Gibbs-Maß, abhängig von den Lagrangeschen Multiplikatoren. Dieses Maß bestimmt eine ganze Familie von Feldtheorien, indem es gestattet n -Punktfunktionen zu definieren:

$$\langle \Phi(x_1) \cdots \Phi(x_n) \rangle_j = \int d\mu_j(\phi) \phi(x_1) \cdots \phi(x_n) \quad (244)$$

Hierbei wirkt $j(x)$ wie ein von außen angelegtes Feld oder auch wie ein *äußerer Strom*, und $Z\{j\}$ ist ein erzeugendes Funktional für die n -Punktfunktionen.

Das Variationsproblem (239) mit Nebenbedingung wird gelöst, indem man den Strom $j(x)$ so bestimmt, daß $\langle \Phi(x) \rangle_j = \phi(x)$ bei gegebenem ϕ erfüllt ist. Wir setzen

$$W_{\text{eff}}^*\{j\} = \hbar \log Z\{j\} \quad (245)$$

und haben in $W_{\text{eff}}^*\{j\}$ ein erzeugendes Funktional für die Kumulanten des Feldes. Insbesondere gilt

$$\frac{\partial W_{\text{eff}}^*\{j\}}{\partial j(x)} = Z\{j\}^{-1} \hbar \frac{\partial Z\{j\}}{\partial j(x)} = \langle \Phi(x) \rangle_j \quad (246)$$

Die Bedingung $\langle \Phi(x) \rangle_j = \phi(x)$ ist also gleichbedeutend mit

$$\frac{\partial W_{\text{eff}}^*\{j\}}{\partial j(x)} = \phi(x) \quad (247)$$

und (247) löst das Variationsproblem

$$\sum_x j(x)\phi(x) - W_{\text{eff}}^*\{j\} = \text{Maximum} \quad (248)$$

(ϕ fest, j variabel). Grund: erstens, (247) führt sicherlich zu einem Extremum der linken Seite in (248); zweitens, die Matrix der zweiten Ableitungen,

$$K_{xx'} = \hbar^2 \frac{\partial^2 \log Z\{j\}}{\partial j(x) \partial j(x')} = \langle \Phi(x)\Phi(x') \rangle - \langle \Phi(x) \rangle \langle \Phi(x') \rangle, \quad (249)$$

erweist sich als die Kovarianzmatrix des Feldes, ist also positiv definit, und somit ist $W_{\text{eff}}^*\{j\}$ ein konvexes Funktional. Folglich: ist $\sum_x j(x)\phi(x) - W_{\text{eff}}^*\{j\}$ extremal, so kann es sich nur um ein Maximum handeln. Wir kommen nun zu den entscheidenden Relationen zwischen den von uns eingeführten Funktionalen:

Theorem

Es sei $W\{\phi\}$ die Wirkung eines euklidischen Feldes, $W_{\text{eff}}\{\phi\}$ die ihr zugeordnete effektive Wirkung und $W_{\text{eff}}^*\{j\}$ das erzeugende Funktional der Kumulanten. Dann gehen W_{eff} und W_{eff}^* durch eine Legendre-Transformation auseinander hervor:

$$W_{\text{eff}}\{\phi\} = \sup_j (\sum_x j(x)\phi(x) - W_{\text{eff}}^*\{j\}) \quad (250)$$

$$W_{\text{eff}}^*\{j\} = \sup_\phi (\sum_x j(x)\phi(x) - W_{\text{eff}}\{\phi\}) \quad (251)$$

Beide Funktionale sind konvex.

Beweis. Die Definitionen benutzend können wir schreiben:

$$\begin{aligned} \sum_x j(x)\phi(x) - W_{\text{eff}}^*\{j\} &= \sum_x j(x)\phi(x) - \hbar \log Z\{j\} \\ &= \inf_\mu \left[\langle \mu, W \rangle - \hbar S(\mu) - \sum_x j(x) \{ \phi(x) - \langle \mu, \Phi(x) \rangle \} \right] \\ &\leq \inf_\mu [\langle \mu, W \rangle - \hbar S(\mu) \mid \langle \mu, \Phi \rangle = \phi] \\ &= W_{\text{eff}}\{\phi\} \end{aligned}$$

Die Ungleichung entsteht, weil das absolute Minimum immer tiefer liegt als das Minimum, das wir in einem Teilraum von W -Maßen finden, der durch eine Nebenbedingung gegeben ist. Die obere Schranke gilt für jeden Wert von $j(x)$. Wir wissen bereits, daß es eine Funktion j gibt, für die Gleichheit erreicht wird, nämlich dann, wenn $\langle \Phi(x) \rangle_j = \phi(x)$ erfüllt ist. In diesem Fall gilt

$$W_{\text{eff}}\{\phi\} = \langle \mu_j, W \rangle - \hbar S(\mu_j) . \quad (252)$$

Also gilt (250). Die Behauptung (251) folgt mit dem gleichen Argument. Die Konvexität von W_{eff}^* haben wir schon oben gezeigt. Sei $\phi = \alpha\phi_1 + (1 - \alpha)\phi_2$, $0 < \alpha < 1$ und j beliebig. Dann gilt

$$W_{\text{eff}}\{\phi_i\} \geq \sum_x j(x)\phi_i(x) - W_{\text{eff}}^*\{j\} \quad i = 1, 2$$

und folglich

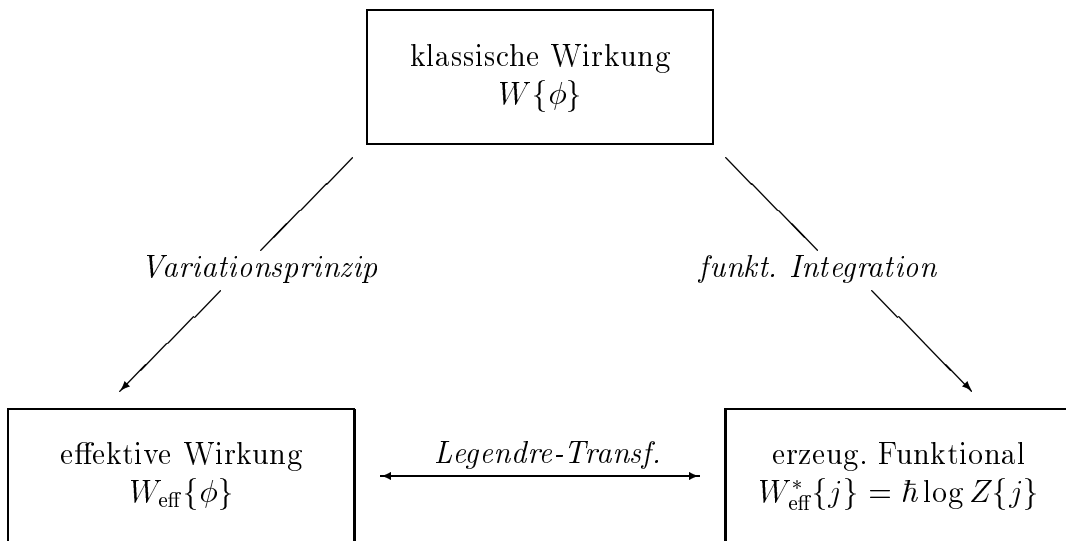
$$\alpha W_{\text{eff}}\{\phi_1\} + (1 - \alpha)W_{\text{eff}}\{\phi_2\} \geq \sum_x j(x)\phi(x) - W_{\text{eff}}^*\{j\}$$

Indem wir das Supremum über alle j bilden, erhalten wir:

$$\alpha W_{\text{eff}}\{\phi_1\} + (1 - \alpha)W_{\text{eff}}\{\phi_2\} \geq W_{\text{eff}}\{\phi\}$$

Dies bestätigt die Konvexität von W_{eff} und das Theorem ist bewiesen.

Zwischen den drei wesentlichen Funktionalen einer Feldtheorie gibt es Zusammenhänge, die wir in einem Diagramm veranschaulichen:



Für die Wirkung eines freien Feldes der Masse m schreiben wir

$$W\{\phi\} = \frac{1}{2}(\phi, (-\Delta + m^2)\phi) := \frac{1}{2} \sum_x \left[\sum_i \{\partial_i \phi(x)\}^2 + m^2 \phi(x)^2 \right] \quad (253)$$

Es ist eine leichte Übungsaufgabe, in dieser speziellen Situation erst W_{eff}^* und dann W_{eff} zu berechnen. Man erhält:

$$W_{\text{eff}}^*\{j\} = \frac{1}{2}(j, (-\Delta + m^2)^{-1}j) - F \quad (254)$$

$$W_{\text{eff}}\{\phi\} = \frac{1}{2}(\phi, (-\Delta + m^2)\phi) + F \quad (255)$$

F ist die in (4.41) berechnete freie Energie; sie ist eine Konstante, weder abhängig von ϕ noch von j . Wenn wir von dem Auftreten dieser Konstanten absehen, so haben wir es mit bilinearen Funktionalen zu tun, die selbstverständlich konvex sind, weil die Bilinearformen positiv sind. Darüberhinaus gilt die Beziehung $W_{\text{eff}}\{\phi\} = W\{\phi\} + F$. Sie ist charakteristisch für freie Felder.

5.7 Das effektive Potential

Der Punkt ist gekommen, wo eine Warnung angebracht erscheint. Es gibt keine strenge noch eine plausible Begründung dafür, daß die effektive Wirkung wieder die Gestalt

$$W_{\text{eff}}\{\phi\} = \sum_x \left\{ \frac{1}{2} \sum_i (\partial_i \phi(x))^2 + U_{\text{eff}}(\phi(x)) \right\} \quad (256)$$

haben sollte. Bestenfalls kann (256) als Ansatz für eine Näherung angesehen werden, wenn man von einer klassischen Wirkung W ausgegangen ist. Ist man jedoch nur an der Modellbildung interessiert, um Erscheinungen wie die spontane Symmetriebrechung zu studieren, so kann es vorteilhaft sein, einen Ansatz wie (256) an die Spitze zu stellen. Die Vorzüge liegen auf der Hand:

- Das erzeugende Funktional $W_{\text{eff}}^*\{j\}$ für die Kumulanten des Feldes ist durch eine einfache Legendre-Transformation aus der effektiven Wirkung zu erhalten. Umfangreiche Integrationen über Räume hoher Dimension werden so vermieden.
- Auch nach Ausführung des thermodynamischen und Kontinuums-Limes behält die effektive Wirkung ihre Bedeutung und definiert das Modell vollständig, während die klassische Wirkung W ihre Bedeutung für die Theorie verliert, weil die (unrenormierten) Kopplungskonstanten der Wechselwirkung i.allg. gegen Null streben.
- In Abhängigkeit von den verschiedenen Parametern der Theorie läßt sich anhand der effektiven Wirkung der Übergang von der symmetrischen in die unsymmetrische Phase, d.h. in die Phase der spontanen Brechung einer Symmetrie, leicht studieren: die Brechung setzt dann ein, wenn W_{eff} zwar symmetrisch ist, aber das Problem $W_{\text{eff}} = \text{Minimum}$ eine unsymmetrische Lösung ϕ besitzt.
- Hat die effektive Wirkung genau die Form, wie sie durch (256) vorgegeben ist, so kann die Symmetrie gegenüber Translationen $x \mapsto x + a$ *nicht* spontan gebrochen sein. Der Grund ist, daß das Minimum, also das Gleichgewicht, dann nur unter zwei Bedingungen angenommen wird:
 1. $\partial_i \phi(x) = 0$, d.h. $\phi(x) = c = \text{konstant}$.
 2. $U_{\text{eff}}(r)$ ist minimal für $r = c$.

Der letzte Punkt macht deutlich, daß dem effektiven Potential $U_{\text{eff}}(r)$ eine zentrale Stellung zukommt. Seine Minima entscheiden darüber, ob das Modell sich in seiner symmetrischen oder unsymmetrischen Phase befindet. Das klassische Potential $U(r)$ gibt hierüber nur unzureichende Auskunft. Seine Minima können mitunter eine spontane Brechung fälschlich vorhersagen, die in Wirklichkeit durch Quantenfluktuationen (Einschalten von \hbar) zerstört wird.

Dies wirft die Frage auf, ob man das effektive Potential nicht auch unabhängig von der Gültigkeit der Darstellung (256) definieren kann, so daß die Existenz dieser wichtigen Größe gesichert ist. Die Antwort ist denkbar einfach.

Definition

Das effektive Potential ist die effektive Wirkung pro Gitterplatz für konstantes $\phi(x)$:

$$U_{\text{eff}}(r) = N^{-4}W_{\text{eff}}\{\phi\} \qquad \phi(x) = r \qquad (257)$$

Ist die Symmetrie unter Translationen nicht spontan gebrochen, so bedeutet dies, daß das Minimum der effektiven Wirkung für ein konstantes ϕ erreicht wird. Dieses Minimum deckt sich dann mit dem Minimum des durch (257) definierten effektiven Potentials. Im Falle eines einzigen reellen Skalarfeldes bleibt somit nur die Möglichkeit, daß die Symmetrie $\phi \mapsto -\phi$ spontan gebrochen wird, d.h. es gilt $U_{\text{eff}}(-r) = U_{\text{eff}}(r)$ und das Minimum liegt bei $r = c \neq 0$. Genau dies wird aus zwei Gründen erschwert:

1. Das effektive Potential ist eine konvexe Funktion. Denn die effektive Wirkung ist ein konvexes Funktional und es gilt (257).
2. Auf einem endlichen Gitter sind alle Abbildungen

$$z \mapsto W_{\text{eff}}^*\{zj\} \qquad z \mapsto W_{\text{eff}}\{z\phi\}$$

analytische Funktionen von $z \in \mathbb{C}$. Die Eigenschaften des klassischen Potentials haben hierauf keinen Einfluß. Aus (257) folgt, daß auch $U_{\text{eff}}(r)$ eine analytische Funktion von r ist.

Man überlegt sich leicht, daß ein konvexes und analytisches Potential mit der Symmetrie $U_{\text{eff}}(-r) = U_{\text{eff}}(r)$ genau *ein* Minimum besitzt, das sich an der Stelle $r = 0$ befindet. Schlußfolgerung:

Auf einem endlichen Gitter gibt es weder einen Phasenübergang, noch eine spontane Symmetriebrechung, noch ein Kondensat $\langle \Phi(x) \rangle \neq 0$.

Auf einem unendlichen Gitter (bei $N \rightarrow \infty$ also) geht von den Eigenschaften des effektiven Potentials nur die Analytizität möglicherweise verloren. Und dies gibt uns eine Chance, die spontane Brechung der Symmetrie $\phi \mapsto -\phi$ dennoch zu beobachten, wie die Skizze verdeutlicht:

Wie man sieht, wird die spontane Brechung nur dadurch ermöglicht, daß das effektive Potential auf einem symmetrischen Intervall $[-c, c]$ konstant ist. Eine solche Funktion kann nicht analytisch sein, es sei denn, sie ist überall konstant. Den beiden Endpunkten des Intervalls entsprechen Gleichgewichtszustände, beschrieben durch W-Maße μ_- und μ_+ , so daß $\langle \mu_{\pm}, \Phi(x) \rangle = \pm c$ gilt. Aber auch jeder andere Wert des Intervalls $[-c, c]$ tritt als mögliches Kondensat auf. Denn, für $0 < \alpha < 1$ ist auch $\mu = \alpha\mu_- + (1 - \alpha)\mu_+$ ein Gleichgewichtszustand mit $\langle \mu, \Phi(x) \rangle = \alpha(-c) + (1 - \alpha)c$. Insbesondere gibt es ein Gleichgewicht, bei dem das Kondensat verschwindet.

Offensichtlich gilt: W-Maße, die Gleichgewichte beschreiben, bilden eine konvexe Menge. Dies bedeutet, daß mit μ_1 und μ_2 auch die konvexe Kombination $\mu = \alpha\mu_1 + (1 - \alpha)\mu_2$ zu dieser Menge gehört ($0 < \alpha < 1$ vorausgesetzt). Gleichgewichtszustände, die sich nicht als konvexe Kombination aus anderen ergeben, die sich somit nicht zerlegen lassen, nennt man *extremal*. In unserem Beispiel zeichnen sich die extremalen Gleichgewichte dadurch aus, daß in ihnen die Kondensate dem Betrage nach maximal mögliche Werte annehmen.

In der statistischen Physik werden Größen wie c , r oder $\phi(x) = \langle \Phi(x) \rangle$ *Ordnungsparameter* der Theorie genannt. Größen wie W_{eff} oder U_{eff} heißen dort *thermodynamische Potentiale*. Die Gleichgewichtsbedingungen lauten in

jedem Fall, so wie in der Feldtheorie: $W_{\text{eff}}\{\phi\} = \text{Minimum}$. Es entspricht allgemeiner Praxis, eine variable Größe der Theorie immer dann einen Ordnungsparameter zu nennen, wenn sie in der symmetrischen Phase verschwindet, jedoch in der unsymmetrischen Phase einen Wert $\neq 0$ annehmen kann (aber nicht muß, weil dies von dem Zustand abhängt).

Das klassische Beispiel eines Ordnungsparameters ist die Magnetisierung (ein Vektor) eines Permanentmagneten. Oberhalb des Curie-Punktes verhält sich das Material paramagnetisch; es befindet sich in der $O(3)$ -symmetrischen Phase. Unterhalb des Curie-Punktes verhält sich das Material ferromagnetisch; es befindet sich dann in der unsymmetrischen Phase mit spontaner Brechung der Rotationssymmetrie. Lassen wir auf eine zunächst unmagnetisierte Probe des Ferromagneten ein starkes Magnetfeld wirken, so finden wir nach dessen Abschaltung eine remanente Magnetisierung M_r mit der Richtung des Feldes. Das gleiche Experiment mit dem entgegengesetzten Magnetfeld erzeugt eine remanente Magnetisierung $-M_r$. Alle Werte des symmetrischen Intervalls $[-M_r, M_r]$ können für die Magnetisierung durch ein geeignetes Experiment erreicht werden. In jedem Fall befindet sich das System in einem thermodynamischen Gleichgewicht, wenn die zeitliche Veränderung des äußeren Feldes so langsam erfolgte (quasistatisch), daß sich zu jedem Zeitpunkt ein Gleichgewicht ausbilden konnte. Wir lernen aus diesen Beispiel auch, daß ein äußeres Feld (in der Feldtheorie: j) nötig ist, um dem Ordnungsparameter einen von Null verschiedenen Wert zu geben. Führen wir mit Hilfe eines zeitabhängigen Feldes einen Kreisprozeß aus, so beobachten wir u.U. eine Hysteresis-Schleife; sie ist charakteristisch für die Existenz einer unsymmetrischen Phase.

5.8 Die Ginsburg-Landau-Gleichungen

Wir wenden uns einem Problem der kondensierten Materie zu, das in der Geschichte der Physik dieses Jahrhunderts eine wichtige Rolle spielte. Es geht dabei um die Beschreibung des supraleitenden Zustandes eines Elektronengases in der Nähe des Phasenüberganges mit den Methoden der *effektiven Wirkung*. Interessante Effekte stellen sich ein, wenn der Supraleiter mit einem äußeren elektromagnetischen Feld in Wechselwirkung steht. Bei Anlegung eines räumlich wie zeitlich konstanten Magnetfeldes kann sich überraschenderweise kein homogener supraleitenden Zustand einstellen. Vielmehr kann der Supraleiter nur auf drei Weisen auf das Feld reagieren:

1. Das Magnetfeld wird verdrängt (Meissner-Ochsenfeld-Effekt).
2. Das Magnetfeld zerstört den supraleitenden Zustand.

3. Ein *inhomogener* supraleitender Zustand wird gebildet.

Die letzte Möglichkeit definiert den Supraleiter zweiter Art. Ginsburg und Landau haben 1950 das Verhalten des Supraleiters in einem äußeren Feld durch nichtlineare Gleichungen beschrieben, die zu ihrer Zeit als Basis einer phänomenologischen Theorie angesehen wurden. Heute wissen wir, daß es sich bei diesen Gleichungen um die Gleichgewichtsbedingungen handelt. Sie leiten sich aus einem Variationsprinzip her, demzufolge die freie Energie ein Minimum annehmen soll. Die freie Energie ist ein Funktional des Ordnungsparameters $\phi \in \mathbb{C}$ und dem im Inneren herrschenden Vektorpotential \mathbf{A} , beides Funktionen von $\mathbf{x} \in E_3$. Auf der Basis der mikroskopischen BCS-Theorie kennt man nun auch die Näherungen, die nötig sind, damit das Ginsburg-Landau-Funktional hergeleitet werden kann, d.h. man hat eine Möglichkeit gefunden, die Konstanten der GL-Theorie aus den atomistischen Größen zu berechnen. Bei dem Bemühen, die GL-Gleichungen zu rechtfertigen, zeigte sich, daß ihr Gültigkeitsbereich auf die Nähe des kritischen Punktes eingeschränkt ist. Die Ginsburg-Landau-Gleichungen enthalten keine Zeitableitungen und lauten:

$$-\frac{1}{4m}(\nabla + 2ie\mathbf{A})^2\phi = \Lambda\phi - 2\lambda|\phi|^2\phi \quad (258)$$

$$\nabla \times (\nabla \times \mathbf{A}) = \frac{ie}{2m}(\bar{\phi}\nabla\phi - \phi\nabla\bar{\phi}) - \frac{2e^2}{m}|\phi|^2\mathbf{A} \quad (259)$$

Sie lösen das Variationsproblem

$$W_{\text{eff}}\{\phi, \mathbf{A}\} = \text{Minimum} \quad (260)$$

für das von unten beschränkte Funktional

$$W_{\text{eff}} = \int d^3x \left\{ \frac{1}{2}(\nabla \times \mathbf{A})^2 + \frac{1}{4m}|(\nabla + 2ie\mathbf{A})\phi|^2 - \Lambda|\phi|^2 + \lambda|\phi|^4 \right\} \quad (261)$$

Die darin vorkommenden Größen bedürfen der Erläuterung:

- $2m$ ist die Masse der Cooper-Paare, und $-2e$ ist ihre Ladung.
- Der Supraleiter besitzt eine endliche, wenn auch große Ausdehnung. Das Vektorpotential unterliegt einer Randbedingung, die ausdrückt, daß das Magnetfeld $\mathbf{B} = \nabla \times \mathbf{A}$ am Rand stetig in das Außenfeld übergeht.
- Die komplexe Funktion ϕ beschreibt das Kondensat der Cooper-Paare. Es handelt sich dabei um einen *makroskopischen* Ordnungsparameter des Gesamtsystems und kann – bis auf eine unwesentliche Änderung der

Normierung – als der Erwartungswert $\langle \psi_{\uparrow}(\mathbf{x})\psi_{\downarrow}(\mathbf{x}) \rangle$ in dem (variablen) Mikrozustand angesehen werden. Das nichtrelativistische ψ -Feld dient zur Beschreibung der Elektronen in der Nähe der Fermi-Kugel. Die Pfeile markieren die beiden Helizitätszustände.

- Bis auf eine additive Konstante stellt W_{eff} die freie Energie des Fermi-Gases in der Nähe thermodynamischen Gleichgewichtes dar. Das Gleichgewicht ist durch die Temperatur T und die Bedingung $W_{\text{eff}} = \textit{Minimum}$ charakterisiert.
- Die Parameter der Theorie sind:

$$\Lambda = \Lambda(T) = \frac{6\pi^2 T_c}{7\zeta(3)\epsilon_F}(T_c - T) \quad \lambda = \frac{9\pi^4 T_c^2}{14\zeta(3)mk_F\epsilon_F} > 0$$

(k_F =Fermi-Impuls, ϵ_F =Fermi-Energie, $\zeta(s)$ =Riemannsche Zetafunktion, T_c = kritische Temperatur). Λ wechselt das Vorzeichen am Phasenübergang.

Die Struktur von W_{eff} und die Interpretation als freie Energie zeigt uns, daß wir es hier mit einer dreidimensionalen Variante der effektiven Wirkung zu tun haben, deren allgemeine Theorie wir für vier euklidische Dimensionen erläutert haben. Das GL-Funktional hat nur einen Schönheitsfehler: für $T < T_c$ ist es nicht konvex. Dies läßt sich jedoch bereinigen. Man kann nämlich jeder nach unten beschränkten, jedoch nichtkonvexen Funktion f die *Einhüllende* f^{**} zuordnen; dies ist die größte konvexe Funktion, die überall kleiner oder gleich f ist. Zugleich entsteht f^{**} durch zweimalige Anwendung²⁷ der Legendre-Transformation auf f . Im GL-Funktional finden wir die Funktion

$$f(r) = -\Lambda r^2 + \lambda r^4$$

Für $T < T_c$ (d.h. $\Lambda > 0$) können wir sie jederzeit durch

$$f^{**}(r) = \begin{cases} -\Lambda r^2 + \lambda r^4 & |r| > a \\ -\lambda a^4 & |r| \leq a \end{cases} \quad a = \sqrt{\frac{\Lambda}{2\lambda}}$$

ersetzen, ohne daß die physikalischen Aussagen dadurch berührt würden. Für $T \geq T_c$, also für $\Lambda < 0$, stimmen f und f^{**} überein.

²⁷Gemäß der allgemeinen Definition bedeutet dies die Berechnung von

$$f^*(t) = \sup_r \{rt - f(r)\} \quad f^{**}(r) = \sup_t \{rt - f^*(t)\}$$

Unterhalb der kritischen Temperatur finden wir ein von Null verschiedenes Kondensat $\phi(\mathbf{x})$. Obwohl die freie Energie invariant ist gegenüber globalen U(1)-Eichtransformationen, finden wir nichtinvariante Gleichgewichtszustände: in der supraleitenden Phase ist die U(1)-Symmetrie spontan gebrochen. Oberhalb der kritischen Temperatur, also in der normalleitenden Phase, gilt $\phi = 0$ im Gleichgewicht, und die Eichinvarianz ist wieder hergestellt.

Für $T < T_c$ gibt es ein kritisches B -Feld, bei dem der Übergang in den normalleitenden Zustand stattfindet. In guter Näherung ergibt sich das kritische Feld aus der Gleichung

$$-\frac{1}{4m}(\nabla + ie\mathbf{B} \times \mathbf{x})^2 \phi(\mathbf{x}) = \Lambda \phi(\mathbf{x}) \quad (262)$$

ϕ beschränkt in E_3 .

Es handelt sich formal um die Schrödinger-Gleichung für ein Teilchen der Masse $2m$ und der Ladung $-2e$ in einem konstanten Magnetfeld \mathbf{B} . Dies führt zu den berühmten Landau-Niveaus

$$\Lambda = \frac{eB}{m}(n + \frac{1}{2}) + \frac{p^2}{4m} \quad n = 0, 1, 2, \dots \quad B = |\mathbf{B}| \quad (263)$$

Hierbei ist p die Projektion des Impulses auf die Richtung von \mathbf{B} . Diese Komponente des Impulses ist beliebig wählbar. Aus (263) folgt die offensichtliche Bedingung

$$\Lambda(T) \geq \frac{eB}{2m} \quad (264)$$

Sie legt einen Bereich der T, B -Ebene fest, für den ein inhomogener supraleitender Zustand existiert. Man erkennt: ist für eine Temperatur T das Feld \mathbf{B} dem Betrage nach größer als

$$B_c = 2(m/e)\Lambda(T) , \quad (265)$$

so läßt sich die Gleichung (262) nur für $\phi = 0$ erfüllen und das System befindet sich in dem normalleitenden Zustand. Für \mathbf{B} in Richtung der z -Achse, $p = p_z = 0$ und $n = 0$ lautet die Lösung

$$\phi_0(x, y) = C(x - iy) \exp\{-\frac{1}{2}eB(x^2 + y^2)\} \quad C \in \mathbb{C} \quad (266)$$

Sie beschreibt einen Wirbelfaden, genauer, einen *Quantenwirbel*, dessen Kern die z -Achse darstellt und dessen Durchmesser

$$d = \sqrt{\frac{\hbar c}{eB}}$$

ist. Quantenwirbel treten auch in Supraflüssigkeiten (Helium) auf. Die Translationen

$$\phi(\mathbf{x}) \rightarrow \phi^{\mathbf{a}}(\mathbf{x}) = \phi(\mathbf{x} - \mathbf{a}) \exp\{ie(\mathbf{B}\mathbf{a}\mathbf{x})\} \quad (267)$$

($(\mathbf{B}\mathbf{a}\mathbf{x})$ =Spatprodukt) bilden eine Symmetriegruppe²⁸ für das Problem (262). $\phi_0^{\mathbf{a}}$ beschreibt einen um den Vektor \mathbf{a} verschobenen Wirbelfaden und stellt ebenfalls eine Gleichgewichtslösung dar. Die allgemeine Lösung – ohne Berücksichtigung der nichtlinearen Terme in den GL-Gleichungen – entsteht durch Superposition von Quantenwirbeln an verschiedenen Orten. Sei \mathcal{G} ein großes (im Idealfall unendlich ausgedehntes) zweidimensionales Gitter senkrecht zu \mathbf{B} , so können wir ihm eine Gleichgewichtslösung der folgenden Art zuordnen:

$$\phi^{\mathcal{G}}(\mathbf{x}) = \sum_{\mathbf{a} \in \mathcal{G}} \phi_0(\mathbf{x} - \mathbf{a}) \exp\{ie(\mathbf{B}\mathbf{a}\mathbf{x})\} \quad (268)$$

Abrikosov hat 1952 gezeigt, daß bei Berücksichtigung der nichtlinearen Terme in den GL-Gleichungen das Gleichgewicht für ein *Dreiecksgitter* eintritt, falls nur Funktionen der Form $\phi^{\mathcal{G}}$ zur Konkurrenz zugelassen sind. Wir beobachten daher in einem Supraleiter zweiter Art eine *periodische* Anordnung von quantisierten Wirbeln. Die Quantisierung äußert sich darin, daß bei dem Umlauf um einen Wirbelfaden sich die Phase von ϕ um 2π ändert. Die zweite GL-Gleichung sagt uns, daß sich entlang eines jeden Wirbelfadens eine Flußröhre ausbildet, in der der magnetische Fluß nicht verschwindet und quantisiert ist. Die Existenz dieser Flußröhren ist experimentell bestätigt worden.

²⁸Siehe die Vorlesung *Gruppentheorie und Quantenmechanik*, SS 1988.

6 Quantisierung der Eichtheorien

Die gängige Vorstellung, daß Wissenschaftler unerbittlich von einem wohlbegründeten Faktum zum nächsten fortschreiten, ohne sich jemals von irgendwelchen unbewiesenen Vermutungen beeinflussen zu lassen, ist ganz falsch.

Alan Turing

6.1 Die euklidische Version der Maxwell-Theorie

6.1.1 Die klassische Situation ($\hbar = 0$)

Wir beginnen die Diskussion der Eichtheorien mit einer Skizze der klassischen Maxwell-Theorie im euklidischen Raum. Ausgangspunkt ist das euklidische Potential $A^k(x)$ mit reellen Komponenten. Es ist wichtig, daß wir es von dem Potential $A_M^\mu(x)$ im Minkowski-Raum unterscheiden. Beide Potentiale hängen formal durch eine Ersetzungsregel miteinander zusammen:

$$iA_M^0(x^0, \mathbf{x}) = A^4(\mathbf{x}, x^4) \quad x^4 = ix^0 \quad (269)$$

$$A_M^k(x^0, \mathbf{x}) = A^k(\mathbf{x}, x^4) \quad k = 1, 2, 3 \quad (270)$$

Diese Regel mißachtet, daß in beiden Theorien das Potential als reell vorausgesetzt wird. Falls jedoch die Komponenten des Potentials analytische Funktionen von x^4 und invariant gegenüber der Zeitumkehr sind, kann die Ersetzungsregel als eine Vorschrift zur analytischen Fortsetzung interpretiert werden, die die Realität der Potentiale respektiert. Als Zeitumkehr betrachten wir die Abbildung

$$[\theta A]^k(\mathbf{x}, x^4) = \begin{cases} -A^k(\mathbf{x}, -x^4) & k = 4 \\ A^k(\mathbf{x}, -x^4) & k = 1, 2, 3 \end{cases} \quad (271)$$

und $\theta A = A$ besagt, daß A^4 eine ungerade Funktion, A^1, A^2, A^3 gerade Funktionen von x^4 sind.

Die euklidische Feldstärke $F_{k\ell} = \partial_\ell A_k - \partial_k A_\ell$ kann wieder nach einem elektrischen und einem magnetischen Anteil zerlegt werden (wohl zu unterscheiden von den entsprechenden Größen der pseudo-euklidischen Maxwell-Theorie):

$$\mathbf{E} = \{F_{14}, F_{24}, F_{34}\} = \{F_{23}^*, F_{31}^*, F_{12}^*\} \quad (272)$$

$$\mathbf{B} = \{F_{23}, F_{31}, F_{12}\} = \{F_{14}^*, F_{24}^*, F_{34}^*\} \quad (273)$$

Hier ist F^* der zu F duale Tensor. Es gilt $F^{**} = F$. Bei dem Übergang zum dualen Tensor vertauschen die Vektoren \mathbf{E} und \mathbf{B} ihre Rollen. Gilt $\mathbf{E} = \mathbf{B}$, äquivalent $F^* = F$, so heißt F *selbstdual*. Gilt $\mathbf{E} = -\mathbf{B}$, äquivalent $F^* = -F$, so heißt F *anti-selbstdual*. Die Zerlegung in einen selbstdualen und einen antiselbstdualen Anteil ist hier immer im Reellen ausführbar. Im Minkowski-Raum war dies nicht möglich. Das euklidische Maxwell-Feld F transformiert sich gemäß einer reduziblen Darstellung $(1, 0) \oplus (0, 1)$ der $SO(4)$, der Gruppe aller Drehungen des Raumes E_4 . Die Zerlegung des Feldes entspricht den beiden irreduziblen Darstellungen $(1, 0)$ und $(0, 1)$ und ist darum invariant gegenüber $SO(4)$ -Transformationen²⁹. Sie ist jedoch nicht $O(4)$ -invariant, weil jede Spiegelung $I : E_4 \rightarrow E_4$ mit $\det I = -1$ selbstduale und anti-selbstduale Komponenten miteinander vertauscht.

Wir schreiben die euklidische Wirkung für das klassische Potential mit äußerer Quelle als

$$W\{A\} = \int d^4x \left\{ \frac{1}{4} F^{k\ell}(x) F_{k\ell}(x) - j_k(x) A^k(x) \right\} \quad (274)$$

Hierbei handelt es sich um ein konvexes Funktional, wie man an der alternativen Form (276) leicht erkennt. Die entscheidende Frage lautet aber: Ist $W\{A\}$ auch von unten beschränkt? Dies ist notwendig, damit ein klassisches Gleichgewicht existiert. Im anderen Fall wäre die klassische Feldtheorie nicht stabil. Nun gilt

$$F^2 = F^{ik} F_{ik} = 2(\mathbf{E}^2 + \mathbf{B}^2) \geq 0$$

und $F^2 = 0$ genau dann, wenn $F = 0$ ist, also für $A^k = \partial^k f$ mit einer Eichfunktion f . Für ein solches Potential haben wir

$$W\{A\} = \int d^4x f(x) \partial_k j^k(x) \quad (275)$$

nach einer partiellen Integration, und $W\{A\}$ ist, wie man sieht, nicht von unten beschränkt (f ist ja beliebig), es sei denn, die Quellfunktion erfüllt die

²⁹Die Gruppe $SO(4)$ besitzt die gleiche Lie-Algebra wie die Produktgruppe $G = SU(2) \otimes SU(2)$. Die beiden Gruppen sind, wie man sagt, *lokal isomorph*. Zugleich ist G die universelle Überlagerungsgruppe der $SO(4)$. Siehe hierzu die Kapitel 3.3 und 5.1.3 der Vorlesung *Gruppentheorie und Quantenmechanik*, SS 88. Die Darstellungstheorie der $SO(4)$ benötigt daher die Darstellungen der $SU(2)$ als Bausteine. Die unitäre und irreduzible Spinordarstellung (j, k) der $SO(4)$ (Darstellung bis auf ein Vorzeichen) liegt vor, wenn die erste $SU(2)$ durch den Spin j , die zweite durch den Spin k repräsentiert ist. Eine gewöhnliche Darstellung der $SO(4)$ liegt vor, wenn $(-1)^{2j+2k} = 1$ ist. Bei dem Wechsel von der euklidischen zur pseudo-euklidischen Struktur geht die unitäre Spinordarstellung (j, k) der $SO(4)$ in die nicht-unitäre Spinordarstellung \mathcal{D}^{jk} der Lorentz-Gruppe über. Siehe hierzu das Kapitel 1.2 der Vorlesung QFT I.

Bedingung $\partial_k j^k(x) = 0$. Dieses voraussetzend können wir schreiben:

$$W\{A\} = \frac{1}{2}(A, \mathcal{C}A) - (A, j) \quad \mathcal{C} \geq 0 \quad (276)$$

$$= \frac{1}{2}((A + \Delta^{-1}j), \mathcal{C}(A + \Delta^{-1}j)) - \frac{1}{2}(j, (-\Delta)^{-1}j) \quad (277)$$

$$\mathcal{C}_{k\ell} = \partial_k \partial_\ell - \delta_{k\ell} \Delta \quad (278)$$

Der Differentialoperator \mathcal{C} ist zwar positiv, jedoch nicht invertierbar. Ausgenutzt wurde $\mathcal{C}(-\Delta)^{-1}j = j$ als Folge der Stromerhaltung. Das Ergebnis zeigt, daß die Divergenzfreiheit des Stromes nicht nur *notwendig*, sondern auch *hinreichend* für die Stabilität ist, und daß das Variationsproblem

$$W\{A\} = \text{Minimum} \quad (279)$$

die allgemeine Lösung $A_k = (-\Delta)^{-1}j_k + \partial_k f$ besitzt, wobei die Eichfunktion f beliebig ist. Die Mehrdeutigkeit der Lösung kommt dadurch zustande, daß der Operator \mathcal{C} zwar positiv, jedoch nicht invertierbar ist. Je zwei Lösungen gehen durch eine Eichtransformation auseinander hervor; die Gruppe der lokalen Eichtransformationen operiert in einer solchen Weise auf der Lösungsmanigfaltigkeit, daß eine 1:1-Korrespondenz zwischen Lösungen und Eichtransformationen besteht. Das Minimum selbst ist eindeutig, d.h. unabhängig von der Wahl der Eichfunktion f :

$$\inf_A \left\{ \frac{1}{2}(A, \mathcal{C}A) - (j, A) \right\} = -\frac{1}{2}(j, (-\Delta)^{-1}j) \quad (280)$$

$$= -\frac{1}{2}(2\pi)^{-2} \int d^4x \int d^4y \frac{j^k(x)j_k(y)}{|x-y|^2} \quad (281)$$

Der Integralkern $(2\pi)^{-2}|x-y|^{-2} = S(x-y, 0)$ ist die Schwinger-Funktion eines masselosen Skalarfeldes (siehe die Formeln 3.12 und 3.13). Stillschweigend wurde vorausgesetzt, daß das auftretende Doppelintegral für große Werte von $|x|$ und $|y|$ konvergiert. Die Singularität bei $x = y$ ist integrabel in der vierdimensionalen euklidischen Raumzeit. Formal betrachtet, sind Ströme Elemente des Raumes

$$\mathcal{J} = \{j : \mathbb{R}^4 \rightarrow \mathbb{R}^4 \mid (j, (-\Delta)^{-1}j) < \infty\}$$

Potentiale A Elemente des Dualraumes \mathcal{J}' . Darüberhinaus erfordert die Stabilität, die Ströme als Elemente des Unterraumes

$$\mathcal{J}_0 = \{j \in \mathcal{J} \mid \partial_k j^k = 0\}$$

anzusehen. Die Beschränkung auf \mathcal{J}_0 bewirkt wiederum, daß viele Gleichgewichtslösungen $A \in \mathcal{J}'$ existieren. Die Lösung ist jedoch eindeutig, wenn

wir sie als Element des Dualraumes \mathcal{J}'_0 auffassen. Denn in \mathcal{J}'_0 werden zwei Potentiale A und A' aus \mathcal{J}' als gleich betrachtet, falls $(A, j) = (A', j)$ für alle $j \in \mathcal{J}_0$ gilt, und dies ist genau dann erfüllt, wenn

$$A'_k = A_k + \partial_k f \quad (282)$$

für eine Eichfunktion f gilt.

Zugleich beschreibt (282) die allgemeine lokale U(1)-Eichtransformation. Bezeichnen wir mit \mathcal{G} die hierdurch erzeugte Eichgruppe, so ist \mathcal{J}'_0 nicht anderes als der Faktorraum von \mathcal{J}' bezüglich der Wirkung dieser Eichgruppe:

$$\mathcal{J}'_0 = \mathcal{J}'/\mathcal{G} \quad (283)$$

Dieser Faktorraum erweist sich als der eigentliche Phasenraum des euklidischen Maxwell-Theorie. Der größere Phasenraum \mathcal{J}' besitzt viele überflüssige Freiheitsgrade. Er ist gefasert, wobei die Punkte einer Faser physikalisch äquivalent sind. Jede Faser stellt eine Kopie der Gruppe \mathcal{G} dar. Im Faktorraum schrumpft jede Faser zu einem einzigen Punkt, der den Zustand des Systems bereits ausreichend beschreibt.

Wie immer in solchen Situationen besteht der Wunsch, auf jeder Faser einen *Repräsentanten* zu wählen, um somit zu einer konkreten Beschreibung des Faktorraumes zu gelangen: man identifiziert den Faktorraum ganz einfach mit dem *System der Repräsentanten*. Man spricht hier auch von einem Querschnitt (eng. *cross section*). In der Regel konstruiert man einen Querschnitt des Faserraumes dadurch, daß man eine Fläche wählt, die jede Faser transversal in einem Punkt schneidet. Dieser Vorgang, bei dem die Repräsentanten sich stetig von Faser zu Faser verändern, wird *Eichfixierung* genannt. Die Fläche wird durch eine Gleichung festgelegt, die man *Eichbedingung* nennt.

Eine Eichfixierung können wir etwa durch die Lorentz-Bedingung $\partial_k A^k = 0$ erreichen. An sich handelt es sich hierbei um ein Kontinuum von Bedingungen (für jedes x eine). Um nur eine Bedingung zu haben, schreiben wir $\int d^4x (\partial_k A^k(x))^2 = 0$. Mit der Einführung eines Langrangeschen Multiplikators $\lambda > 0$ erhielten wir so das Variationsproblem

$$W\{A; \lambda\} := \int d^4x \left\{ \frac{1}{4} F^{k\ell}(x) F_{k\ell}(x) + \frac{1}{2} \lambda (\partial_k A^k)^2 - j_k(x) A^k(x) \right\} = \text{Minimum} \quad (284)$$

Während für $\lambda = 0$ die Wirkung nicht strikt konvex ist, sondern vielmehr ein Regentrinnenprofil zeigt,

gilt für $\lambda > 0$, daß $W\{A; \lambda\}$ ein strikt konvexes Funktional ist mit einem eindeutigen Minimum und einem monotonen Anstieg in alle Richtungen (Hängematten-Profil):

Nun ist es nicht mehr notwendig, den Strom als divergenzfrei vorauszusetzen, um die Stabilität der Wirkung zu garantieren. Wir fordern lediglich $j \in \mathcal{J}$ und finden das Minimum mit der oben dargestellten Methode:

$$W\{A; \lambda\} = \frac{1}{2}(A, \mathcal{C}A) - (A, j) \quad (285)$$

$$= \frac{1}{2}((A - \mathcal{C}^{-1}j)\mathcal{C}(A - \mathcal{C}^{-1}j)) - \frac{1}{2}(j, \mathcal{C}^{-1}j) \quad (286)$$

$$\mathcal{C} = (1 - \lambda)\partial \otimes \partial - \Delta > 0 \quad (287)$$

$$\mathcal{C}^{-1} = (1 - \lambda^{-1})\Delta^{-2}\partial \otimes \partial - \Delta^{-1} \quad (288)$$

Also

$$\inf_{A \in \mathcal{J}'} W\{A; \lambda\} = -\frac{1}{2}(j, \mathcal{C}^{-1}j) \quad (289)$$

Das Infimum wird nur an der Stelle $A = \mathcal{C}^{-1}j$ angenommen. Die Eindeutigkeit kommt dadurch zustande, daß \mathcal{C} für $\lambda > 0$ ein *invertierbarer* positiver Operator ist. Sobald der Strom j divergenzfrei ist, lautet die Lösung $A = (-\Delta)^{-1}j$ und das Minimum stimmt mit dem früher berechneten Ausdruck überein. Fazit: die Ersetzung der ursprünglichen Wirkung $W\{A\}$ durch $W\{A; \lambda\}$ mit $\lambda > 0$ hat die Physik in keinerlei Weise beeinflußt, die Entartung des Minimums der Wirkung wurde jedoch aufgehoben. Anstelle von $A_k = (-\Delta)^{-1}j + \partial_k f$ (f beliebig) erhalten wir nunmehr den Repräsentanten $A_k = (-\Delta)^{-1}j$, der die Lorentz-Bedingung $\partial_k A^k = 0$ erfüllt. Man nennt $\frac{1}{2}\lambda \int d^4x (\partial_k A^k)^2$ den *eichfixierenden Term* in der Wirkung.

6.1.2 Die allgemeine Situation ($\hbar > 0$)

Nachdem wir die klassische Theorie gut im Griff haben, können wir durch "Einschalten" von \hbar die zugehörige Quantenfeldtheorie erzeugen und ihre Ei-

genschaften studieren. An die Stelle des Hamiltonschen Prinzips der kleinsten Wirkung tritt nun das Variationsprinzip

$$\langle \mu, W \rangle - \hbar S(\mu) = \text{Minimum} \quad (290)$$

wobei μ ein W-Maß auf \mathcal{J}' darstellt, über das zu variieren ist. Jedem μ ist eine Entropie $S(\mu)$ zugeordnet (um deren Definition wir uns hier nicht sorgen), und W ist durch

$$\begin{aligned} W\{A; \lambda\} &= \frac{1}{2}(A, \mathcal{C}A) = \int d^4x \left\{ \frac{1}{4} F^{k\ell}(x) F_{k\ell}(x) + \frac{1}{2} \lambda (\partial_k A^k)^2 \right\} \\ \mathcal{C} &= (1 - \lambda) \partial \otimes \partial - \Delta \quad (\lambda > 0) \end{aligned} \quad (291)$$

gegeben. Die Wechselwirkung mit einem äußeren Strom haben wir nicht mit in die Wirkung aufgenommen. Durch Hinzunahme eines eichfixierenden Terms wird erreicht, daß bei Variation über alle W-Maße μ auf \mathcal{J}' wir genau ein Gibbs-Maß finden, für das $\langle \mu, W \rangle - \hbar S(\mu)$ minimal ist. Wie soll man das lösende Gibbs-Maß beschreiben? Ein Teil der Antwort lautet: das Gibbs-Maß ist festgelegt, wenn man seine Fourier-Transformierte kennt. Mit dem Hinweis auf die früher getroffene Vereinbarung (s. Seite 49 oben) und in völliger Analogie zu den Formeln für ein freies Skalarfeld können wir hier die definierende Gleichung sofort angeben:

$$\int d\mu(A) e^{i(j,A)} = \langle e^{i(j,A)} \rangle = \exp\left\{-\frac{1}{2} \hbar(j, \mathcal{C}^{-1}j)\right\} \quad (j \in \mathcal{J}) \quad (292)$$

Sie charakterisiert μ als ein Gauß-Maß auf \mathcal{J}' , für das wir auch formal schreiben:

$$\begin{aligned} d\mu(A) &= \mathcal{D}A Z^{-1} \exp(-\hbar^{-1}W\{A; \lambda\}) \\ Z &= \int \mathcal{D}A \exp(-\hbar^{-1}W\{A; \lambda\}) \end{aligned} \quad (293)$$

Welche Auswirkung hat der eichfixierende Term auf die Integration über den Faserraum \mathcal{J}' ? Entlang einer jeden Faser

$$A_k^f = A_k + \partial_k f \quad \partial^k A_k = 0$$

(A fest, f variabel) wird $\exp(-\hbar^{-1}W\{A^f; \lambda\})$ zu einer Gauß-Glocke mit Maximum bei $f = 0$, so daß der Hauptbeitrag des Funktionalintegrals aus der Umgebung der Mannigfaltigkeit $\partial^k A_k = 0$ kommt. Je größer λ gewählt wird, umso mehr ähnelt die Gauß-Funktion einer δ -Funktion.

Aus dem erzeugenden Funktional (292) erhalten wir alle n -Punktfunktionen des Potentials $A_k(x)$. Die Kenntnis der Zweipunktfunktion ist dazu ausreichend:

$$\begin{aligned}\langle A_k(x)A_\ell(x') \rangle &= \hbar[\mathcal{C}^{-1}]_{k\ell}(x, x') \\ &= \frac{\hbar}{(2\pi)^4} \int d^4p \left\{ (\lambda^{-1} - 1) \frac{p_k p_\ell}{p^2} + \delta_{k\ell} \right\} \frac{\exp\{ip(x - x')\}}{p^2}\end{aligned}$$

Diese Funktion hängt von λ , also von der Wahl des eichfixierenden Terms in der Wirkung ab. Diese Tatsache spiegelt nur wieder, daß auf dem klassischen Niveau das Potential eine eichabhängige Größe ist. Der unbeobachtbare Parameter λ fällt heraus, sobald wir zu den Feldstärken übergehen:

$$\begin{aligned}\langle F_{jk}(x)F_{\ell m}(x') \rangle &= \frac{\hbar}{(2\pi)^4} \int d^4p c_{jk,\ell m}(p) \frac{\exp\{ip(x - x')\}}{p^2} \\ c_{jk,\ell m}(p) &= \delta_{k\ell} p_j p_m + \delta_{jm} p_k p_\ell - \delta_{j\ell} p_k p_m - \delta_{km} p_j p_\ell\end{aligned}$$

Alle Größen, die auf klassischem Niveau eichinvariant sind, bleiben in einer Quantenfeldtheorie unberührt von der Einführung eichfixierender Terme. Zwei Spezialfälle tragen einen Namen:

- $\lambda = 1$ *Feynman-Eichung*. Hier ist die euklidische Zweipunktfunktion des Potentials proportional zu $\delta_{k\ell}$. Das entspricht dem Gupta-Bleuler-Verfahren zur Quantisierung von A_M^μ .
- $\lambda = \infty$ *Landau-Eichung*. Diese Wahl markiert einen singulären Grenzfall, weil die Matrix P mit den Komponenten $p_{k\ell} = \delta_{k\ell} - p^{-2} p_k p_\ell$ einen Projektor darstellt: es existiert \mathcal{C}^{-1} , aber nicht \mathcal{C} . Der Träger des zugehörigen Gibbs-Maßes μ ist die Fläche $\partial_k A^k = 0$ (Im Limes $\lambda \rightarrow \infty$ entartet das Gauß-Maß: in jeder Richtung transversal zur Fläche wird aus der Gauß-Glocke eine δ -Funktion).

6.2 Nicht-abelsche Eichtheorien

6.2.1 Einige Vorbetrachtungen

Um möglichst einfache und definierte Verhältnisse zu haben, betrachten wir die $SU(n)$ -Eichtheorie ohne Materiefeld. Wir erinnern daran, daß die Lie-Algebra $\mathfrak{su}(n)$ aus antihermiteschen spurfreien Matrizen besteht, die man als Elemente eines reell-linearen Raumes auffaßt, in dem eine Basis $-it_a$ ($a = 1, \dots, n^2 - 1$) existiert, so daß die t_a hermitesche spurfreie $n \times n$ -Matrizen sind mit

$$\frac{1}{2} \text{Spur } t_a t_b = \delta_{ab} .$$

Das euklidische Eichfeld $A_k(x)$ nimmt Werte in $\mathfrak{su}(\mathbf{n})$ an und kann deshalb nach der Basis zerlegt werden:

$$A_k(x) = -i \sum_a A_k^a(x) t_a \quad (294)$$

Die Komponenten $A_k^a(x)$ sind gewöhnliche reelle Vektorfelder. Der nicht-abelsche Charakter der Eichgruppe bewirkt, daß diese Vektorfelder untereinander in Wechselwirkung stehen und die Kopplungskonstante g nicht Null gesetzt werden darf. Man erkennt dies daran, daß g aus den Feldgleichungen eliminiert werden kann, etwa dadurch, daß man $gA_k(x)$ als das neue Potential einführt. Dieser Normierungskonvention wollen wir hier folgen, weil so g aus nahezu allen Formeln verbannt wird: nur die euklidische Wirkung enthält die Kopplungskonstante noch in Form eines Vorfaktors g^{-2} .

Die kovariante Ableitung schreiben wir als $D_k = \partial_k - A_k$. Für die Feldstärken gibt es verschiedene Darstellungen:

$$F_{k\ell} = [D_k, D_\ell] = D_\ell A_k - D_k A_\ell \quad (295)$$

$$= A_{k|\ell} - A_{\ell|k} + [A_k, A_\ell] \quad (296)$$

Die euklidische Wirkung ist allein in den Feldstärken ausdrückbar:

$$W\{A\} = -\frac{1}{8g^2} \int d^4x \text{Spur } F_{k\ell} F^{k\ell} \quad (297)$$

Sie ist positiv, weil man nach einer Zerlegung $F_{k\ell} = -i \sum_a F_{k\ell}^a t_a$ auch schreiben kann:

$$W\{A\} = \frac{1}{4g^2} \int d^4x \sum_{a k \ell} (F_{k\ell}^a)^2 \quad (298)$$

Die lokale Eichgruppe \mathcal{G} besteht aus Elementen u , die für sich genommen als Funktionen aufzufassen sind,

$$u : E_4 \rightarrow SU(n), \quad x \mapsto u(x),$$

wobei die *Eichtransformation* des Potentials durch

$$A_k^u := u A_k u^{-1} + u_{|k} u^{-1} \quad (299)$$

gegeben sind. Wie in QFT I bewiesen, ist $u_{|k} u^{-1}$ für festes x und k ein Element der Lie-Algebra $\mathfrak{su}(\mathbf{n})$.

Das W-Maß

$$d\mu(A) = \mathcal{D}A Z^{-1} \exp(-\hbar^{-1} W\{A\}) \quad (300)$$

ist aus den Gründen, wie wir sie schon in der Maxwell-Theorie kennenlernten, schlecht definiert, ja unsinnig, weil es zuviele Richtungen im Raum der Potentiale gibt, in denen die Wirkung (wegen der Eichinvarianz) konstant ist. Auch hier sind wir genötigt, einen eichfixierenden Term in die Wirkung einzuführen:

$$W\{A; \lambda\} = -\frac{1}{8g^2} \int d^4x \text{Spur} \{F_{k\ell} F^{k\ell} + \lambda(A_{|k}^k)^2\} \quad (\lambda > 0) \quad (301)$$

Jedoch, im Gegensatz zu dem abelschen Fall können wir jetzt nicht ohne weiteres behaupten, daß mit der neuen Wirkung Erwartungswerte wie $\langle F_{kj}(x)F_{\ell m}(y) \rangle$ automatisch unabhängig von dem Parameter λ sind (die Störungstheorie zeigt, daß das nicht der Fall ist). Da physikalische Ergebnisse nicht von einem unphysikalischen Parameter abhängen dürfen, müssen wir uns eine bessere Wahl der Wirkung überlegen. Der Weg dorthin führt über mehrere Stufen. Fernab von dem gesicherten Boden der Mathematik bewegen wir uns nun in einem Bereich, in dem die mathematische Fantasie vorherrschend ist.

6.3 Die Faddeev-Popov-Theorie

6.3.1 Erste Stufe: Eine Zerlegung der Zahl 1

Jedes Element der Eichgruppe \mathcal{G} hat die Gestalt $u(x) = e^{a(x)}$ mit $a(x) \in \mathbf{su}(\mathbf{n})$. Es ist zweckmäßig, die Funktionen $a : E_4 \rightarrow \mathbf{su}(\mathbf{n})$ geeignet einzuschränken. Wir führen den Raum \mathcal{H} so ein, daß er alle Funktionen a enthält, für die die Bedingung $\|a\|^2 := -\frac{1}{2} \int d^4x \text{Spur} \{a(x)\}^2 < \infty$ erfüllt ist. Unter dem Skalarprodukt

$$(a, b) = -\frac{1}{2} \int d^4x \text{Spur} a(x)b(x)$$

besitzt \mathcal{H} die Struktur eines reellen Hilbertraumes. In diesem Raum sei eine Basis $(e_\alpha)_{\alpha=1,2,\dots}$ so gewählt, daß jede Funktion $e_\alpha(x)$ beliebig oft differenzierbar und exponentiell abfallend ist (man wähle etwa die Eigenfunktionen des harmonischen Oszillators in vier Dimensionen und multipliziere diese mit $-it_\alpha$). Insbesondere gilt also $(e_\alpha, e_\beta) = \delta_{\alpha\beta}$. Unter geeigneten Bedingungen an das Potential $A_k(x)$ definiert

$$d_k a := [D_k, a] = a_{|k} + [a, A_k] \quad (302)$$

einen Operator d_k auf \mathcal{H} mit den üblichen Eigenschaften eines Differentialoperators: er ist unbeschränkt, nicht überall definiert und antisymmetrisch: es gilt $(a, d_k b) = -(d_k a, b)$ für a und b im Definitionsbereich.

Die Bedeutung des Operators d_k wird klar, sobald wir eine einparametrische Untergruppe $u(s) \in \mathcal{G}$ ($s \geq 0$) von Eichtransformationen ins Auge fassen. Wir haben dann

$$u(s) = e^{sa} = \mathbf{1} + sa + O(s^2) \quad a \in \mathcal{H} \quad (303)$$

und, wie aus (299) folgt,

$$A_k^{u(s)} = A_k + sd_k a + O(s^2) \quad (304)$$

d.h. $d_k a$ charakterisiert Änderungen des Potentials bei infinitesimalen Umeichungen.

Die Lorentz-Bedingung $A_k^{|k} = 0$ schreiben wir auch $\partial A = 0$. Sie bleibt unter Eichtransformationen nicht erhalten, und infinitesimale Änderungen lassen sich mit Hilfe des Operators $\mathcal{M} = -\partial^k d_k$ angeben:

$$\partial A^{u(s)} = \partial A - s\mathcal{M}a + O(s^2) \quad (305)$$

$$\mathcal{M}a = -\Delta a + \partial^k [A_k, a] \quad (a \in \mathcal{H}) \quad (306)$$

Eine Variante der Lorentz-Bedingung ist $\partial A = C$ mit $C \in \mathcal{H}$. Für die weitere Diskussion benötigen wir eine wichtige Voraussetzung:

Gilt $\partial A = C$ für ein Potential A_k und $C \in \mathcal{H}$, so besitzt $\partial A^u = C$ nur die Lösung $u = 1$.

In Worten: die Eichbedingung ist nur einmal entlang einer Faser $\{A^u \mid u \in \mathcal{G}\}$ erfüllt. Es hat sich herausgestellt, daß diese Hypothese streng genommen falsch ist (*Gribov ambiguity*). Für $C = 0$ stellt sich die Situation so dar: die beiden Gleichungen

$$\partial^k A_k = 0 \quad \partial^k (u A_k u^{-1} + u_{|k} u^{-1}) = 0 \quad (307)$$

führen auf

$$\partial^k a_k + [a^k, A_k^u] = 0 \quad a_k := u_{|k} u^{-1} \in \mathcal{H} \quad (308)$$

Mit dem Ansatz $a_k(x) = \partial_k \alpha(x)$ und unter der Bedingung (1) α genügend klein, (2) A genügend groß, gibt es neben $\alpha = 0$ wenigstens eine weitere Lösung $\alpha \neq 0$ der Differentialgleichung. Die von Gribov entdeckte Mehrdeutigkeit tritt für gewisse Potentiale A auf. Eine Umgebung von $A = 0$ ist frei davon. Möglicherweise ist der Einwand von Gribov physikalisch irrelevant. Es entspricht der allgemeinen Praxis ihn zu ignorieren.

Wir parametrisieren nun die gesamte Eichgruppe \mathcal{G} und wählen hierzu die Basis in \mathcal{H} :

$$u = \exp \sum_{\alpha=1}^{\infty} s_{\alpha} e_{\alpha} \quad \mathbf{s}^2 := \sum_{\alpha=1}^{\infty} s_{\alpha}^2 < \infty \quad (309)$$

Die Entwicklungsformel lautet nun:

$$\partial A^u = \partial A - \sum_{\beta=1}^{\infty} s_{\beta} \mathcal{M} e_{\beta} + O(\mathbf{s}^2) \quad (310)$$

Besitzt C die Entwicklung $C = \sum_{\alpha=1}^{\infty} c_{\alpha} e_{\alpha}$ ($c_{\alpha} \in \mathbb{R}$) und gilt $\partial A = C$, so erhält man:

$$c_{\alpha} - (e_{\alpha}, \partial A^{u(\mathbf{s})}) = \sum_{\beta=1}^{\infty} s_{\beta} (e_{\alpha}, \mathcal{M} e_{\beta}) + O(\mathbf{s}^2) \quad (311)$$

Wir führen nun eine Deltafunktion ein, die im Funktionalintegral die Eichbedingung $\partial A = C$ aufrecht erhalten soll. Wir definieren (der Boden wird nun schwankend!):

$$\delta\{C - \partial A\} := \prod_{\alpha=1}^{\infty} \delta(c_{\alpha} - (e_{\alpha}, \partial A)) \quad (312)$$

$$\Delta(A, C) := \int_{\mathcal{G}} \mathcal{D}u \delta\{C - \partial A^u\} \quad (313)$$

$$\det \mathcal{M} := \det(e_{\alpha}, \mathcal{M} e_{\beta})_{\alpha, \beta=1, \dots, \infty} \quad (314)$$

indem wir uns vorstellen, daß \mathcal{G} ein invariantes Maß (Haarsches Maß) $\mathcal{D}u$ besitzt, das in einer Umgebung des neutralen Elementes $u = 1$ die Form hat:

$$\mathcal{D}u = f(s_1, s_2, \dots) \prod_{\alpha=1}^{\infty} ds_{\alpha} \quad f(0, 0, \dots) = 1$$

Beachte: Obwohl $SU(n)$ eine kompakte Gruppe ist und deshalb ein endliches Gruppenvolumen besitzt, gilt dies nicht mehr für \mathcal{G} . Wie *nichtkompakt* \mathcal{G} wirklich ist, merkt man daran, daß jede einparametrische Untergruppe $u(s) = \exp\{sa\}$ bereits nichtkompakt (d.h. der Gruppe \mathbb{R} isomorph) ist, wenn $a(x)$ eine stetige, jedoch nichtkonstante Funktion auf E_4 darstellt. Somit haben wir

$$\text{vol}(\mathcal{G}) = \int \mathcal{D}u = \infty$$

Wir formulieren zwei Behauptungen:

- Aus $\partial A = C$ folgt

$$\Delta(A, C) = |\det \mathcal{M}|^{-1} \quad (315)$$

- Für alle $u \in \mathcal{G}$ gilt $\Delta(A^u, C) = \Delta(A, C)$.

Der ‘‘Beweis’’ benutzt die Definitionen, die Mißachtung des Einwandes von Gribov, die Entwicklungsformel (311), die Eigenschaft der Deltafunktion³⁰ unter Änderung der Koordinaten und die Invarianz des Maßes $\mathcal{D}u$.

Als *Zerlegung der Zahl 1* bezeichnen wir die Formel

$$1 = \Delta(A, C)^{-1} \int \mathcal{D}u \delta(C - \partial A^u) \quad (316)$$

6.3.2 Zweite Stufe: Division durch das Gruppenvolumen

Es sei $f\{A\}$ ein eichinvariantes Funktional von $A_k(x)$, d.h. es gilt $f\{A^u\} = f\{A\}$ für alle $u \in \mathcal{G}$. Der Mittelwert

$$\langle f \rangle = \frac{\int \mathcal{D}A \exp(-\hbar^{-1}W\{A\})f\{A\}}{\int \mathcal{D}A \exp(-\hbar^{-1}W\{A\})} = \frac{\infty}{\infty} \quad (317)$$

ist, wie wir wissen, schlecht definiert. Wir fügen deshalb in Zähler und Nenner unter dem Integral die Darstellung der Zahl 1 aus dem vorigen Abschnitt ein und erhalten so nach Vertauschung der Integrationsreihenfolge:

$$\langle f \rangle = \frac{\int \mathcal{D}u \int \mathcal{D}A \Delta(A, C) \delta(C - \partial A^u)^{-1} \exp(-\hbar^{-1}W\{A\})f\{A\}}{\int \mathcal{D}u \int \mathcal{D}A \Delta(A, C)^{-1} \delta(C - \partial A^u) \exp(-\hbar^{-1}W\{A\})}$$

Die Eichinvarianz des Maßes $\mathcal{D}A$ benutzend finden wir:

$$\langle f \rangle = \frac{\int \mathcal{D}u \int \mathcal{D}A \Delta(A^{u^{-1}}, C)^{-1} \delta(C - \partial A) \exp(-\hbar^{-1}W\{A^{u^{-1}}\})f\{A^{u^{-1}}\}}{\int \mathcal{D}u \int \mathcal{D}A \Delta(A^{u^{-1}}, C)^{-1} \delta(C - \partial A) \exp(-\hbar^{-1}W\{A^{u^{-1}}\})}$$

Die Funktionale $\Delta(A, C)$, $W\{A\}$ und $f\{A\}$ sind jedoch eichinvariant. Somit ist der Integrand gar nicht abhängig von $u \in \mathcal{G}$. Ergebnis:

$$\langle f \rangle = \frac{\text{vol}(\mathcal{G}) \int \mathcal{D}A \Delta(A, C)^{-1} \delta(C - \partial A) \exp(-\hbar^{-1}W\{A\})f\{A\}}{\text{vol}(\mathcal{G}) \int \mathcal{D}A \Delta(A, C)^{-1} \delta(C - \partial A) \exp(-\hbar^{-1}W\{A\})}$$

³⁰Es sei $U \subset \mathbf{R}$ eine Umgebung von $x = 0$. Für eine Bijektion $\phi : U \rightarrow U$ mit den Eigenschaften $\phi(0) = 0$ und $\phi(x) = mx + O(x^2)$, $m \neq 0$, folgt

$$\int_U dx \delta(\phi(x)) = |m|^{-1}$$

Aus dieser Grundformel beweist man: Für eine Umgebung $U \subset \mathbf{R}^n$ von $x = 0$ und einer Bijektion $\phi : U \rightarrow U$ mit den Eigenschaften $\phi(0) = 0$ und $\phi(x) = Mx + O(x^2)$, $\det M \neq 0$, folgt

$$\int_U dx \delta(\phi(x)) = |\det M|^{-1}$$

Es gibt Situationen, in denen eine Erweiterung dieser Formel auf Räume unendlicher Dimension einen Sinn hat.

Hier kürzt sich das Gruppenvolumen heraus. Offensichtlich ist die Tatsache $\text{vol}(\mathcal{G}) = \infty$ eine Ursache für das ungünstige Verhalten der Ausgangsdefinition (317).

Die Funktionalintegrale in Zähler und Nenner sind durch die δ -Funktion auf die Mannigfaltigkeit eingeschränkt, die durch die Eichbedingung $\partial A = C$ beschrieben wird. Somit kommt (315) zur Anwendung, und wir können schreiben:

$$\begin{aligned} \langle f \rangle &= \int \mathcal{D}A |\det \mathcal{M}| \delta(C - \partial A) e^{-\hbar^{-1}W\{A\}} = \\ &= \int \mathcal{D}A |\det \mathcal{M}| \delta(C - \partial A) e^{-\hbar^{-1}W\{A\}} f\{A\} \end{aligned}$$

Beide Seiten werden nun über $C \in \mathcal{H}$ mit dem W-Maß

$$\begin{aligned} d\nu(C) &= z^{-1} \mathcal{D}C \exp \left\{ -\frac{\lambda}{4\hbar g^2} \|C\|^2 \right\} \quad (\lambda > 0) \\ \|C\|^2 &= (C, C) = \sum_{\alpha} c_{\alpha}^2 \quad \mathcal{D}C = \prod_{\alpha} dc_{\alpha} \end{aligned}$$

integriert. Für ein eichinvariantes Funktional $f\{A\}$ ist der Mittelwert $\langle f \rangle$ unabhängig von C . Wir vertauschen wieder die Integrationsreihenfolge und erhalten:

$$\begin{aligned} \langle f \rangle &= \int \mathcal{D}A |\det \mathcal{M}| \exp \left\{ -\frac{1}{\hbar} W\{A\} - \frac{\lambda}{4\hbar g^2} \|\partial A\|^2 \right\} = \\ &= \int \mathcal{D}A |\det \mathcal{M}| \exp \left\{ -\frac{1}{\hbar} W\{A\} - \frac{\lambda}{4\hbar g^2} \|\partial A\|^2 \right\} f\{A\} \end{aligned}$$

Es ist uns gelungen, den eichfixierenden Term in die Wirkung einzuführen. Die neue Wirkung hat die Form (301). Also:

$$\langle f \rangle = \frac{\int \mathcal{D}A |\det \mathcal{M}| \exp\{-\hbar^{-1}W\{A; \lambda\}\} f\{A\}}{\int \mathcal{D}A |\det \mathcal{M}| \exp\{-\hbar^{-1}W\{A; \lambda\}\}} \quad (318)$$

Etwas unerwartet und nicht vorauszusehen ist das Auftreten einer Determinante unter dem Integral. In einer *abelschen* Eichtheorie kürzt sich $\det \mathcal{M}$ heraus, weil dann der Operator \mathcal{M} unabhängig von dem Potential $A_k(x)$ ist. Die Anwesenheit der Determinante ist also charakteristisch für die nicht-abelsche Eichtheorie. Es besteht jedoch kein Zweifel: ohne irgendeine Form der Regularisierung ist diese Determinante undefiniert.

6.3.3 Dritte Stufe: Tanz der Geister

Wir erinnern daran, daß \mathcal{H} als ein \mathbb{R} -linearer Raum und \mathcal{M} als ein \mathbb{R} -linearer Operator auf diesem Raum eingeführt war. Folglich sind die Matrixelemente von \mathcal{M} bezüglich der Basis (e_α) reell. Es ist zu betonen, daß i.allg. \mathcal{M} kein symmetrischer Operator ist, d.h. wir haben $(a, \mathcal{M}b) \neq (\mathcal{M}a, b)$. Vielmehr gilt: \mathcal{M} ist genau dann symmetrisch³¹, wenn die Lorentz-Bedingung $\partial A = 0$ erfüllt ist. Diese Situation läßt sich nur im Limes $\lambda \rightarrow \infty$ (Landau-Eichung) herstellen. Selbst wenn \mathcal{M} symmetrisch ist, hängt es von $A_k(x)$ ab, ob der Operator positiv ist. Für $A = 0$ gilt in der Tat $\mathcal{M} = -\Delta \geq 0$. Es ist nicht einmal gewiß, ob die Positivität noch in einer Umgebung von $A = 0$ erhalten bleibt.

Eine Regularisierung der Determinante von der Art

$$\det_N \mathcal{M} = \det(e_\alpha, \mathcal{M}e_\beta)_{\alpha, \beta=1, \dots, N} \quad (319)$$

liefert eine reelle Zahl. Gleichzeitig ist $\det_N \mathcal{M}$ ein Funktional A und nimmt einen positiven Wert an der Stelle $A = 0$ an. Wann gilt also $|\det_N \mathcal{M}| = \det_N \mathcal{M}$ im Funktionalintegral? Die Absolutzeichen dürfen wir offenbar genau dann weglassen, wenn die folgende Behauptung korrekt ist:

Für jedes Eichpotential A gilt $\det_N \mathcal{M} \geq 0$.

Auch hier können wir die Richtigkeit nur für eine Umgebung von $A = 0$ sofort einsehen. Den Beweis für große Werte des Potentials müssen wir schuldig bleiben.

Der Faktor $\det \mathcal{M}$ im Funktionalintegral beschreibt eine Selbstwechselwirkung des Eichpotentials. Wollte man sie störungstheoretisch berücksichtigen, so hätte man von einer Zerlegung der folgenden Art auszugehen:

$$\det \mathcal{M} = \det(-\Delta) \det(1 + \mathcal{K}) \quad (320)$$

$$\mathcal{K}a = -\Delta^{-1} \partial^k [A_k, a] \quad a \in \mathcal{H} \quad (321)$$

$$\det(1 + \mathcal{K}) = \exp \text{Spur} \log(1 + \mathcal{K}) \quad (322)$$

$$= \exp \text{Spur} (\mathcal{K} - \frac{1}{2} \mathcal{K}^2 + \dots) \quad (323)$$

Der Operator \mathcal{K} und seine Potenzen führen uns auf *nichtlokale*³² Wechselwirkungen des Eichpotentials mit sich selbst. Dies ist nicht erwünscht, und wir suchen nach einem anderen Weg der Beschreibung. Wenn die Determinante das Resultat einer *lokalen* Wechselwirkung sein soll, so verlangt dies von uns,

³¹Für alle $a, b \in \mathcal{H}$ gilt $(a, \mathcal{M}b) - (\mathcal{M}a, b) = ([a, C], b)$ mit $C := \partial A$.

³²Der Grund hierfür ist die Anwesenheit des nichtlokalen Operators Δ^{-1} in der Definition von \mathcal{K} .

daß wir fiktive $\mathbf{su}(\mathbf{n})$ -wertige Skalarfelder $\eta(x)$ und $\bar{\eta}(x)$ einführen, die mit dem Eichpotential wechselwirken:

$$\det(\hbar^{-1}\mathcal{M}) = \int \mathcal{D}\eta \mathcal{D}\bar{\eta} \exp\{-\hbar^{-1}(\bar{\eta}, \mathcal{M}\eta)\} \quad (324)$$

$$(\bar{\eta}, \mathcal{M}\eta) = -\frac{1}{2} \int d^4x \text{Spur } \bar{\eta}(x)(\mathcal{M}\eta)(x) \quad (325)$$

$$= -\frac{1}{2} \int d^4x \text{Spur } \{\bar{\eta}^{|k}(x)\eta_{|k}(x)\} \quad (326)$$

Hier tritt neben der gewöhnlichen Ableitung $\bar{\eta}^{|k}$ auch die kovariante Ableitung auf:

$$\eta_{|k}(x) = [D_k, \eta](x) = \partial_k \eta(x) + [\eta(x), A_k(x)] \quad (327)$$

Damit die Darstellung (324) mit Hilfe eines Integrals vom Gauß-Typ korrekt ist, müssen die Felder η und $\bar{\eta}$ Grassmann-Variable sein (dies wird in dem Kapitel 7 näher beschrieben). Gemeint ist dies so: entwickeln wir die Felder nach der Basis $-it_\alpha$ der $\mathbf{su}(\mathbf{n})$, so sind die dadurch definierten Feldkomponenten η_α and $\bar{\eta}_\alpha$ Grassmann-Variable. Daß es sich hierbei um physikalische Felder handelt, dürfen wir nicht einmal als Hypothese einführen. Ihnen korrespondieren daher auch keine beobachtbaren Teilchen, und wir bezeichnen η und $\bar{\eta}$ als *Geisterfelder* (sog. Faddeev-Popov-Geister). Sie haben lediglich die Aufgabe, die Quantisierung nicht-abelscher Eichtheorien (mit der Methode der Funktionalintegrale) durch Einführung einer *lokalen* Wechselwirkung so zu beschreiben, daß eine Störungsreihe erzeugt wird, deren Terme durch Feynman-Graphen im herkömmlichen Sinne ausdrückbar sind.

Wenn man das Teilchenbild für die Faddeev-Popov-Geister überhaupt verwenden will, so entsprechen den Geisterfeldern Geister-Fermionen ohne Masse und Spin. Handelte es sich um wirkliche Teilchen, so wäre das Spin-Statistik-Theorem verletzt. Die Geister gehören einem Multiplett an, das der adjungierten Darstellung der Eichgruppe $SU(n)$ mit der Dimension $n^2 - 1$ entspricht. Die Wechselwirkung behandelt η und $\bar{\eta}$ nicht in symmetrischer Weise: dies ist sehr ungewöhnlich für Fermi-Felder. Nur im Grenzfall $\lambda \rightarrow \infty$ (Landau-Eichung) gilt $(\bar{\eta}, \mathcal{M}\eta) = (\mathcal{M}\bar{\eta}, \eta) = (\eta, \mathcal{M}\bar{\eta})$.

Die endgültige Wirkung hat die Gestalt:

$$W\{A, \eta, \bar{\eta}; \lambda\} = -\frac{1}{2} \int d^4x \text{Spur } \{(2g)^{-2}[F_{k\ell}F^{k\ell} + \lambda(A_{|k}^k)^2] + \bar{\eta}^{|k}\eta_{|k}\}$$

Drei unterschiedliche Ausdrücke bestimmen diese Formel, (1) die klassische Energiedichte der Feldstärke $F_{k\ell}$, (2) der eichfixierende Term und (3) die Wechselwirkung mit den Geisterfeldern.

6.4 Eichtheorien auf dem Gitter

Die Formulierung von Wilson

Die Kontinuumsformulierung der Eichtheorien charakterisiert das Eichfeld als eine Funktion mit Werten in einer Lie-Algebra \mathfrak{g} zur kompakten Eichgruppe G . Sobald wir den Raum E_4 durch das Gitter $(\mathbb{Z}_N)^4$ ersetzen, ist diese Interpretation des Eichfeldes ungeeignet. Grund: für eine Eichtransformation $u(x)$ ist $u|_k(x)u(x)^{-1}$ kein Element der Lie-Algebra mehr, sobald die Ableitung durch einen Differenz ersetzt wird: $u|_k(x) = u(x + e_k) - u(x)$. Für das Gitter benutzt man, einem Vorschlag von Wilson folgend, eine sehr elegante neue Formulierung, die diese Schwierigkeit vermeidet.

Das ursprüngliche Eichpotential $A_k(x) \in \mathfrak{g}$ wird ersetzt durch ein endliches System von dynamischen Variablen $U_{kx} \in G$. Das Indexpaar kx dient zur Charakterisierung einer *Kante* (eng. *link*) der Gitters. Die Kante verbindet zwei benachbarte Punkte (Abstand 1) im Gitter und ist *gerichtet*: sie führt von x zu $x + e_k$. Unter einer lokalen Eichtransformation verstehen wir die Vorschrift

$$U_{kx} \rightarrow U_{kx}^u := u(x + e_k)U_{kx}u(x)^{-1} \quad (328)$$

für jede Wahl von $u(x) \in G$. Die Gruppe aller lokalen Eichtransformationen ist somit *kompakt*, nämlich gleich dem direkten Produkt von kompakten Gruppen:

$$\mathcal{G} = \prod_x G \quad (\text{Produkt über alle Gitterpunkte}) \quad (329)$$

Die Existenz des Haarschen Maßes auf \mathcal{G} ist gewährleistet, und wir haben

$$\text{vol}(\mathcal{G}) = \prod_x \text{vol}(G) = \prod_x 1 = 1 \quad (330)$$

Der Phasenraum Ω dieser Feldtheorie ebenfalls ist kompakt. Denn er entspricht einem direkten Produkt von kompakten Räumen:

$$\Omega = \prod_{kx} G \quad (\text{Produkt über alle Kanten}) \quad (331)$$

Aus diesem Grund spricht man auch von der *kompakten Formulierung* der Eichtheorien, also etwa von der kompakten QED, der kompakten QCD usw.

Wie gewinnt man die Kontinuumsformulierung zurück? Wir betrachten das unendlich ausgedehnte Gitter. Durch eine Skalentransformation führen wir die Gitterkonstante a ein und schreiben in dem neuen System $U_{kx} = \exp\{aA_k(x)\}$ mit $x \in (a\mathbb{Z}_N)^4$. Im Limes $a \rightarrow 0$ beschreibt $A_k(x)$ das Eichpotential im Kontinuum. Wir zeigen, daß es die richtigen Transformationseigenschaften besitzt:

Es sei $u : E_4 \rightarrow G$ differenzierbar. Dann gilt

$$u(x + ae_k)e^{aA_k(x)}u(x)^{-1} = e^{aA_k^u(x)+O(a^2)}$$

$$\text{mit } A_k^u = uA_ku^{-1} + u|_ku^{-1}$$

Der Beweis ist einfach: man entwickelt nach a und vergleicht die linearen Terme auf beiden Seiten.

Gehen wir nun umgekehrt von einer Kontinuumsformulierung aus, so können wir dem Eichpotential $A_k(x)$ Gruppenelemente der folgenden Art zuordnen³³:

$$U_C = \exp \int_C dx^k A_k(x) \quad (332)$$

Hier ist C irgendein gerichteter Weg in E_4 . Führt C geradewegs vom Punkt x zum Punkt $x + ae_k$, so schreiben wir $U_C = U_{kx}$ und haben so die Gitterapproximation des Eichfeldes gewonnen.

Für die QED im Kontinuum lassen sich Wegintegrale des Potentials A mit Hilfe des Satzes von Gauß auf die Feldstärke zurückführen, wenn der Weg C identisch mit dem Rand eines orientierten Flächenstückes Q ist. Wir schreiben dann $C = \partial Q$ und

$$\int_{\partial Q} dx^k A_k(x) = \int \int_Q dx^k \wedge dx^\ell F_{k\ell}(x) \quad (333)$$

In den nichtabelschen Eichtheorien übernimmt eine andere Größe die Rolle des Wegintegrals:

$$U_C = P \exp \int_C dx^k A_k(x) \quad (334)$$

Das P-Exponential ist der Limes eines pfadgeordneten Produktes

$$\begin{aligned} P \exp \int_C dx^k A_k(x) &= \lim_{n \rightarrow \infty} U_{nn} \cdots U_{n2} U_{n1} \\ U_{ni} &= \exp \int_{C_{ni}} dx^k A_k(x) \\ \lim_{n \rightarrow \infty} \max_{1 \leq i \leq n} |C_{ni}| &= 0 \quad C = C_{nn} + \cdots + C_{n2} + C_{n1} \end{aligned}$$

³³Bei $\hbar = c = 1$ ist die physikalische Dimension des Potentials $Länge^{-1}$. Wegintegrale des Potentials sind somit dimensionslos. Für $\hbar \neq 1$ müssen wir schreiben: $U_C = \exp\{\hbar^{-1} \int_C dx^k A_k(x)\}$. Die Normierung des Potentials ist so gewählt (s. Abschnitt 5.2.1), daß es die Kopplungskonstante bereits als Faktor enthält. In einer U(1)-Eichtheorie ist diese Konvention jedoch unüblich. Außerdem wählt man hier A und F reell. Wollte man die allgemeinen Überlegungen auf die Verhältnisse der QED übertragen, so hätte man in allen Formeln dieses Abschnittes die Ersetzung

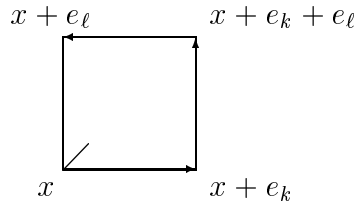
$$A \rightarrow -ieA \quad F \rightarrow -ieF \quad \frac{1}{2}\text{Spur} \rightarrow 1 \quad g^2 \rightarrow e^2 = 4\pi\alpha$$

vorzunehmen.

Hierbei wird der Weg C in n Teilstücke C_{ni} zerlegt (beginnend mit C_{n1}), deren Längen $|C_{ni}|$ gegen Null streben. Ist ∂Q die Berandung eines Quadrates Q mit der Seitenlänge a , so gilt

$$\log U_{\partial Q} = \iint_Q dx^k \wedge dx^\ell F_{k\ell}(x) + O(a^3) \quad (a \rightarrow 0) \quad (335)$$

Diese Formel kann uns dazu verhelfen, diejenige Größe auf dem Gitter zu konstruieren, die im Limes $a \rightarrow 0$ die Feldstärke F beschreibt. Als *Plakette* des Gitters bezeichnen wir jedes (orientierte) Einheitsquadrat, das von vier Kanten des Gitters berandet wird:



Die Bezeichnung für eine solche Plakette lautet $p = xk\ell$ mit $1 \leq k < \ell \leq 4$. Beginnend im Punkt x wird der Rand ∂p so durchlaufen, wie es die Skizze zeigt. Dabei werden zwei der Gitterkanten entgegen ihrer natürlichen Orientierung durchlaufen. Wir berücksichtigen dies durch die Ersetzung $U \rightarrow U^{-1}$ in dem pfadgeordneten Produkt:

$$U_{\partial p} := U_{x,\ell}^{-1} U_{x+e_\ell,k}^{-1} U_{x+e_k,\ell} U_{x,k} \quad (336)$$

Diese Größe hat durch ihre Konstruktion ein sehr einfaches Verhalten unter lokalen Eichtransformationen (328):

$$U_{\partial p}^u = u(x)^{-1} U_{\partial p} u(x) \quad (337)$$

Ist also $f(z)$ irgendein Polynom von $z \in \mathbb{C}$, so wird $\text{Spur} f(U_{\partial p})$ zu einer eichinvarianten Größe. Diese Eigenschaft wollen wir bei der Konstruktion der Wirkung ausnutzen.

Nach Einführung einer Gitterkonstanten a gilt

$$U_{\partial p} = \exp\{-a^2 F_{k\ell}(x) + O(a^3)\} \quad p = \text{Plakette } xk\ell$$

mit $F_{k\ell} = A_{k|\ell} - A_{\ell|k} + [A_k, A_\ell]$ und $U_{x,k} = \exp\{aA_k(x)\}$, wenn $A_k(x)$ als differenzierbar vorausgesetzt wird.

Auch hier führt man den Beweis, indem man beide Seiten nach a bis zu Termen der Ordnung a^2 entwickelt.

Für kleine Werte der Gitterkonstanten a erhalten wir so die Approximation

$$1 - U_{\partial p} = a^2 F_{k\ell}(x) \quad p = \text{Plakette } xk\ell \quad (338)$$

Die Wirkung, wie sie Wilson vorschlug, lautet:

$$W(U) = \frac{1}{4g^2} \sum_p \text{Spur} (1 - U_{\partial p})^* (1 - U_{\partial p}) \quad (339)$$

Hier wird über alle Plaketten des Gitters summiert. Dabei ist zu beachten, daß \sum_p mit $\sum_x \sum_{k<\ell}$ zu identifizieren ist. Wir erhalten daher in der Näherung (338)

$$W(U) = -\frac{1}{8g^2} \sum_x a^4 \text{Spur} \sum_{k\ell} (F_{k\ell}(x))^2 \quad (340)$$

wie gewünscht; denn $\sum_x a^4(\dots)$ strebt gegen $\int d^4x (\dots)$ im Limes $a \rightarrow 0$:

Im Kontinuumsliches strebt die Wilson-Wirkung gegen die euklidische Wirkung eines selbstwechselwirkenden Eichfeldes.

Mit $d\nu(u)$ bezeichnen wir das invariante (auf 1 normierte) Haarsche Maß der Eichgruppe G und setzen

$$\mathcal{D}U = \prod_{xk} d\nu(U_{xk}) \quad (\text{Produkt über alle Kanten}) \quad (341)$$

Das normierte Gibbs-Maß

$$d\mu(U) = Z^{-1} \mathcal{D}U \exp\{-W(U)\} \quad (342)$$

legt nun endgültig die quantisierte Eichfeldtheorie auf dem Gitter fest, indem mit seiner Hilfe alle Erwartungswerte der dynamischen Variablen berechnet werden können. Die von Wilson vorgeschlagene Quantisierung benötigt keine eichfixierenden Terme und keine Geisterfelder in der Wirkung. Das Gibbs-Maß ist durch seine Konstruktion ohne jede Einschränkung *invariant* gegenüber der Gruppe \mathcal{G} der lokalen Eichtransformationen. Dies bedeutet, daß Erwartungswerte grundsätzlich eichinvariant sind, und zwar auch von solchen dynamischen Variablen, die ein nichttriviales Transformationsverhalten unter der Wirkung von \mathcal{G} haben.

Hier muß man nun fragen: Wie ist es überhaupt möglich zu verstehen, daß die Wilson-Theorie in die Faddeev-Popov-Theorie übergeht, wenn erst der thermodynamische Limes und danach der Kontinuumsliches ausgeführt wird?

Eine naheliegende Antwort wäre: Die lokale Eichsymmetrie wird im Limes des unendlich großen Gitters ($N \rightarrow \infty$) spontan gebrochen; die verschiedenen Gleichgewichte, die sich einstellen, lassen sich durch den Parameter λ , den Vorfaktor des eichfixierenden Terms in der Wirkung, charakterisieren. Mit anderen Worten: λ ist in Wirklichkeit ein *Ordnungsparameter*.

Die Antwort kann jedoch nicht richtig sein; denn ein wichtiges Resultat sagt: *die Invarianz einer Gittertheorie unter lokalen Eichtransformationen ist im thermodynamischen Limes niemals spontan gebrochen* (Elitzurs Theorem). Offenbar liegt die Antwort in den Details des Kontinuumslimes ($a \rightarrow 0$) verborgen. Wir sind aber weit davon entfernt, diese Details zu kennen.

6.5 Die Kunst der Schleifen (Wilson Loops)

6.5.1 Statische Approximation der Yukawa-Kopplung

Unser nächstes Ziel ist die eichinvariante Charakterisierung der Kräfte, die durch den Austausch von Eichbosonen hervorgerufen werden. Wir erinnern an ein früher (QFT I Abschnitt 7.4) diskutiertes Beispiel: die Wechselwirkung zweier geladener Teilchen der Massen m und M , vermittelt durch den Austausch eines Photons, im Limes $M \rightarrow \infty$, dem sog. *statischen Limes*. Es zeigte sich, daß die Wechselwirkung des leichteren Teilchens mit dem als unendlich schwer gedachten Partner durch das Coulomb-Potential beschrieben wurde. In der statischen Näherung büßt ein schweres Teilchen einen wesentlichen Teil seiner dynamischen Freiheitsgrade ein, weil auf es keine Energie übertragen werden kann. Der Limes $M \rightarrow \infty$ bewirkt, in der Sprache der Störungstheorie, daß alle Beiträge zur Streuung verschwinden, bei denen das schwere Teilchen virtuell, d.h. in Form einer inneren Linie des zugeordneten Feynman-Graphen, auftritt. Man nennt dies die *Entkopplung* des geladenen Teilchens von dem Photonfeld. Die Entkopplung aller geladenen Teilchen bewirkt, daß ein $U(1)$ -Eichfeld ein *freies Feld* ist, dessen Propagator in der Gupta-Bleuler-Quantisierung die Form hat:

$$(\Omega, T A_\mu(x) A_\nu(x') \Omega) = -g_{\mu\nu} D_F(x - x') \quad (343)$$

Die Anwesenheit eines schweren Teilchens ruft einen äußeren Strom j^μ hervor. Die einfachste Gestalt, die ein solcher Strom haben kann, ist

$$j^0 = q\delta^3(\mathbf{x}), \quad j^1 = j^2 = j^3 = 0 \quad (344)$$

Hierbei wurde angenommen, daß das Teilchen in $\mathbf{x} = 0$ ruht und keine Ausdehnung besitzt. Jeder Strom erzeugt ein klassisches Maxwell-Feld in seiner Umgebung:

$$A_\mu^{klass}(x) = (\Omega, T A_\mu(x) A(j) \Omega) \quad (345)$$

Hat der Strom die spezielle Form (344), so erhalten wir

$$A_0^{klass} = qV(r), \quad A_i^{klass} = 0, \quad i = 1, 2, 3 \quad r = |\mathbf{x}| \quad (346)$$

$$V(r) = - \int_{-\infty}^{\infty} dx^0 D_F(x) = \frac{1}{4\pi r} \quad (347)$$

Auf dieses Resultat sind wir schon früher gestoßen. Es hängt, wie wir hier sehen, von der gewählten Eichung des Photonfeldes ab.

Ähnlich liegen die Dinge in einer $SU(n)$ -Eichtheorie mit Yukawa-Kopplung der Fermionen an das Eichfeld $A_\mu(x) \in \mathfrak{su}(\mathbf{n})$. In der statischen Näherung, bei der Fermionen und Eichfeld entkoppeln, geht das Eichfeld *nicht* in ein freies Feld über: der nichtabelsche Charakter der Eichgruppe verhindert dies. Die Anwesenheit eines schweren Fermions erzeugt einen Strom $j^\mu(x) \in \mathfrak{su}(\mathbf{n})$ und dieser ein klassisches Potential $A_\mu^{klass}(x) = (\Omega, TA_\mu(x)A(j)\Omega) \in \mathfrak{su}(\mathbf{n})$. Jedoch sind wir nicht mehr sicher, welche Form es hat.

Gewöhnlich finden wir das Verhalten

$$(\Omega, TA_\mu(x)A_\nu(x')\Omega) \rightarrow 0 \quad |\mathbf{x} - \mathbf{x}'| \rightarrow \infty \quad (348)$$

Es bewirkt, daß die Kraft, die zwischen zwei schweren Fermionen wirksam ist, für große Abstände gegen Null strebt. Die Fermionen erfahren also eine wirkliche Streuung und sind nicht aneinander gebunden. Zweifel kommen auf, ob dies in allen Eichtheorien wirklich der Fall ist, ob nicht Feynman-Funktionen auch anwachsen können. Die mit dem Eichfeld wechselwirkenden Fermionen würden dann in keinem Experiment als freie Teilchen auftreten, weil es die Zufuhr einer unendlichen Energie voraussetzt. Diese Erscheinung, wenn es sie überhaupt geben sollte, nennt man im Englischen *confinement*.

Wir kehren zur euklidischen Formulierung der Feldtheorie zurück. Das Potential $V(r) = (4\pi r)^{-1}$, das für die QED typisch ist, kann auch aus der Schwinger-Funktion des Photonfeldes ermittelt werden:

$$V(r) = \int_{-\infty}^{\infty} dx^4 S(x) \quad r = |\mathbf{x}| \quad (349)$$

$$\langle A_k(x)A_\ell(x') \rangle = \delta_{k\ell}S(x-x') + \text{eichabhängige Terme} \quad (350)$$

Grund: Die Fourier-Transformierte $\tilde{S}(\mathbf{p}, p^4)$ entsteht durch analytische Fortsetzung aus $-\tilde{D}_F(p^0, \mathbf{p})$, aber nur der Wert in dem Punkt $p^0 = p^4 = 0$ geht in die Rechnung ein: in diesem Punkt haben wir $\tilde{S}(\mathbf{p}, 0) = -\tilde{D}_F(0, \mathbf{p})$.

Die Verhältnisse sind deshalb so einfach in der QED, weil nach einer statischen Näherung das Photonfeld frei ist und $S(x) = (2\pi)^{-2}x^{-2}$ gilt. Das klassische euklidische Potential einer Stromverteilung j^k ist dann durch

$$A_k^{klass}(x) = \langle A_k(x)A(j) \rangle = \frac{1}{4\pi^2} \int d^4x' \frac{j_k(x')}{(x-x')^2} \quad (351)$$

gegeben. Setzen wir speziell $j^1 = j^2 = j^3 = 0, j^4 = q\delta^3(\mathbf{x})$, so erhalten wir das elektrostatische Potential einer Punktladung q in unveränderter Form.

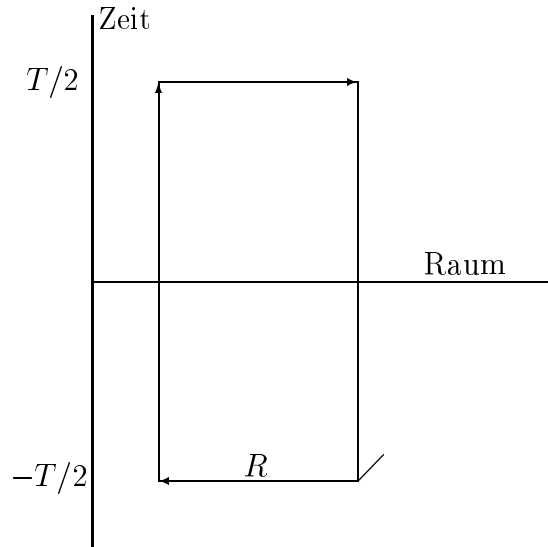
6.5.2 Schleifenintegrale in der euklidischen QED

Experimentell wird das Potential A_k^{klass} durch eine weitere Ladung (z.B. eine ruhende Punktladung q' im Abstand R) ausgemessen. Die Testladung definiert einen weiteren Strom j' , und die relative Energie beider Ströme läßt sich als

$$E = \lim_{T \rightarrow \infty} \frac{1}{4\pi^2 T} \int_{x_4=-T/2}^{x_4=T/2} d^4x \int_{x'_4=-T/2}^{x'_4=T/2} d^4x' \frac{j^k(x)j'_k(x')}{(x-x')^2} \quad (352)$$

angeben. Hier haben wir zunächst die Wirkung der Ströme j und j' zwischen den Zeiten $-T/2$ und $T/2$ berechnet und dann die Wirkung pro Zeit im Limes $T \rightarrow \infty$ als Wechselwirkungsenergie interpretiert. Die Energie geht gegen Null, wenn die beiden Ladungen separiert werden.

Die Situation *zwei ruhende punktförmige Teilchen mit den Ladungen e und $-e$ im Abstand R* können wir durch einen geschlossenen Pfad C im euklidischen Raum, dem sog. *Wilson loop*, in Form eines Rechteckes mit den Seiten R und T approximieren:



Mit Hilfe dieser Schleife formen wir zunächst das Schleifenintegral

$$A_C = \int_C dx^k A_k(x) \quad (353)$$

und dann den Erwartungswert

$$\langle A_C A_C \rangle = \int_C dx^k \int_C dx'^k S(x-x'), \quad (354)$$

der für genügend großes T die Wirkung der Ladungen e und $-e$ aufeinander, aber auch die Selbstwechselwirkung, nämlich das Produkt *Selbstenergie* $\times T$, enthält.

Das Integral (354) ist wegen der unendlichen Selbstenergie von Punktladungen singular. Statt den Ladungen eine gewisse Ausdehnung zu geben, regularisieren wir das Integral, indem wir $S(x)$ durch

$$S_a(x) = \begin{cases} (2\pi x)^{-2} & x^2 > a^2 \\ 0 & x^2 < a^2 \end{cases} \quad (355)$$

ersetzen. Das regularisierte Integral bezeichnen wir mit $\langle A_C A_C \rangle_a$. Die Integration ist nun elementar und erzeugt eine Reihe von Ausdrücken:

$$\begin{aligned} 2\pi^2 \langle A_C A_C \rangle_a &= \frac{T}{a} - \log \frac{T}{a} + \log \left(1 + \frac{T^2}{R^2} \right) - 2 \frac{T}{R} \tan^{-1} \frac{T}{R} \\ &+ \frac{R}{a} - \log \frac{R}{a} + \log \left(1 + \frac{R^2}{T^2} \right) - 2 \frac{R}{T} \tan^{-1} \frac{R}{T} \end{aligned} \quad (356)$$

($0 \leq \tan^{-1} x \leq \pi/2$). Die Vorschrift das Potential zu errechnen lautet:

$$V(R) := \lim_{T \rightarrow \infty} \frac{1}{2T} \langle A_C A_C \rangle_a \quad (357)$$

Mit ihr erhalten wir das Ergebnis

$$V(R) = \frac{1}{4\pi^2 a} - \frac{1}{4\pi R} \quad (358)$$

Die Konstante $(4\pi^2 a)^{-1}$ ist eine unbeobachtbare Größe. Für $a \rightarrow 0$ strebt sie nach ∞ . Der zweite Term beschreibt das anziehende Coulomb-Potential der beiden Teilchen mit entgegengesetzter Ladung.

Eine äquivalente Vorschrift, das Potential zweier statischer Ladungen zu berechnen, erhält man, wenn von der $U(1)$ -Variablen

$$U_C = \exp\{-ie A_C\} = \exp\{-ie \int_C dx^k A_k(x)\} \quad (359)$$

ausgegangen wird. Denn ihr Erwartungswert hängt mit dem eben berechneten eng zusammen:

$$\langle U_C \rangle = \exp\{-\frac{1}{2} e^2 \langle A_C A_C \rangle\} \quad (360)$$

Nach einer Regularisierung und mit dem oben gewählten Weg C erhielten wir die asymptotische Darstellung

$$\langle U_C \rangle = \exp\{-e^2 V(R) T\} \quad T \rightarrow \infty \quad (361)$$

6.5.3 Flächengesetz oder Umfangsgesetz?

Das asymptotische Verhalten des Erwartungswertes $\langle U_C \rangle$ kann man in einer Weise diskutieren, bei der Raum und Zeit symmetrisch behandelt werden. Unterwerfen wir die Schleife C einer Dilatation, die alle Koordinaten mit dem gleichen Faktor multipliziert, so würde ein gegebenes Rechteck mit den Seiten R und T so anwachsen, daß R und T zugleich gegen ∞ streben unter Festhaltung von R/T . Aus den Formeln (356) und (360) – gültig für die QED – folgt dann die asymptotische Darstellung

$$\langle U_C \rangle = \exp\{-\sigma|C|\} \quad |C| = 2R + 2T, \quad R, T \rightarrow \infty \quad (362)$$

mit $\sigma = e^2/(8\pi^2 a)$. Da $|C|$ der Umfang des Rechteckes ist, sprechen wir hier von einem *Umfangsgesetz*. Dies Gesetz ist offenbar charakteristisch für eine Situation, bei der $V(R)$ für großes R konstant wird, und $-\sigma$ erweist sich als die Selbstenergie der Ladungen e und $-e$:

$$\lim_{R \rightarrow \infty} \frac{1}{2} e(-e)V(R) = -\frac{e^2}{8\pi^2 a}$$

Nun sei $A_k(x)$ das Eichfeld für eine nichtabelsche Eichgruppe und U_C das P-Exponential des Schleifenintegrals wie im Abschnitt 5.3 definiert. A priori wissen wir nichts über das asymptotische Verhalten des Erwartungswertes $\langle U_C \rangle$. Eine Regularisierung ist aber auch hier sicher notwendig, damit der Ausdruck überhaupt einen Sinn bekommt. Die Regularisierung führt eine Längenskala a ein, auf die R und T bezogen sind: $\langle U_C \rangle$ ist eine Funktion der dimensionslosen Größen R/a und T/a .

Auf einem Gitter übernimmt die Gitterkonstante a die Rolle dieser Längenskala und eine weitere Regularisierung ist hier überflüssig. Es sei $a = 1$. Die unitäre Matrix U_C ist ein pfadgeordnetes Produkt, nämlich ein Produkt über die Gitterkanten c_1, \dots, c_n , die der Pfad C mit der Länge $n = 2R + 2T$ der Reihe nach durchläuft (beginnend mit c_1):

$$U_C = U_{c_n} \cdots U_{c_2} U_{c_1} \quad U_c = \begin{cases} U_{xk} & c : x \rightarrow x + e_k \\ U_{xk}^{-1} & c : x + e_k \rightarrow x \end{cases} \quad (363)$$

Selbst wenn der Weg C geschlossen ist, also wenn $C = \partial G$ gilt, besitzt er einen Anfangspunkt x , von dem U_C abhängt. Das macht, daß U_C (im nichtabelschen Fall) immer noch eichabhängig ist. Erst $\text{Spur } U_{\partial G}$ ist unabhängig von dem gewählten Anfangspunkt und eichinvariant. Gleiches gilt für $\langle U_{\partial G} \rangle$; denn in der Wilson-Formulierung ist die Wirkung und somit auch der Gibbs-Zustand eichinvariant.

Zwei unterschiedliche asymptotische Verhaltensweisen stehen zur Diskussion:

$$\langle U_{\partial G} \rangle = \begin{cases} \exp\{-\sigma|\partial G|\} & \text{Umfangsgesetz (kein 'confinement')} \\ \exp\{-\kappa|G|\} & \text{Flächengesetz ('confinement')} \end{cases} \quad (364)$$

Aber auch andere Möglichkeiten, die zwischen diesen beiden Optionen liegen, sind theoretisch denkbar. Streng genommen läßt sich dieses Verhalten nur auf einem unendlich großen Gitter formulieren und auch dort nur überprüfen. Die Konstanten, σ oder κ sind notwendig nichtnegativ (warum?). Wir haben schon gesehen, daß Fermionen in der statischen Näherung als freie Teilchen auftreten, wenn das Umfangsgesetz gilt. Was folgt, wenn das Flächengesetz in Kraft ist? Für ein Rechteck mit den Seiten R und T haben wir dann einerseits

$$\langle U_{\partial G} \rangle = \exp\{-V(R)T\} \quad T \rightarrow \infty \quad (365)$$

andererseits aber

$$\langle U_{\partial G} \rangle = \exp\{-\kappa RT\} \quad R, T \rightarrow \infty \quad (366)$$

Also

$$V(R) = \kappa R \quad R \rightarrow \infty \quad (367)$$

Ergebnis: Unter den Fermionen ziehen sich Teilchen und Antiteilchen im Abstand R (genügend groß) mit *konstanter Kraft* κ an, und wir beobachten den Effekt des *'confinement'*. Einiges spricht dafür, daß diese Situation in der QCD auftritt, wodurch erklärt wird, daß wir die Quarks nicht als freie Teilchen in den gegenwärtigen Experimenten sehen.

7 Fermionen

7.1 Das Dirac-Feld mit acht Komponenten

Wir beginnen mit einem Rückblick auf die Dirac-Theorie im Minkowski-Raum M_4 und setzen in allen Formeln $\hbar = 1$. Genauso wie es manchmal bequem sein kann, neben einem komplexen Skalarfeld ϕ auch das konjugierte Feld $\bar{\phi}$ einzuführen und beide Felder als gleichberechtigt zu betrachten, so wird man – wenn es angebracht erscheint – neben dem Dirac-Feld ψ auch seinen ladungskongugierten Partner ψ^c einführen, um aus beiden Feldern einen achtkomponentigen Bispinor zu formen:

$$\Psi = \begin{pmatrix} \psi \\ \psi^c \end{pmatrix} \quad (368)$$

Durch die Verdopplung der Komponenten erreichen wir, daß die Ladungskonjugation durch eine *lineare* Transformation beschrieben werden kann: sie vertauscht ψ mit ψ^c .

In der Dirac-Theorie führt man die Ladungskonjugation durch die folgende Vorschrift ein:

$$\psi^c(x) = C\bar{\psi}(x)^T \quad (369)$$

wobei die 4×4 -Matrix C durch die Eigenschaften

$$(\gamma^\mu C)^T = \gamma^\mu C \quad C^T = C^* = C^{-1} = -C \quad (370)$$

definiert ist. Insbesondere sehen wir, daß C unitär ist. Für die von uns benutzte Darstellung der Dirac-Matrizen (siehe QFT I Abschnitt 1.3.1) gilt

$$C = i\gamma^2\gamma^0 = \begin{pmatrix} -i\sigma_2 & 0 \\ 0 & i\sigma_2 \end{pmatrix} \quad i\sigma_2 = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ -1 & 0 \end{pmatrix} \quad (371)$$

Mit der üblichen Zerlegung in zweikomponentige Spinoren

$$\psi = \begin{pmatrix} \xi \\ \chi \end{pmatrix} \quad \psi^c = \begin{pmatrix} \xi^c \\ \chi^c \end{pmatrix}$$

lautet die Vorschrift so:

$$\xi^c(x) = -i\sigma_2\chi^*(x) \quad (372)$$

$$\chi^c(x) = i\sigma_2\xi^*(x) \quad (373)$$

Rechtshändige Spinoren werden in linkshändige verwandelt und umgekehrt. Für die schwache Wechselwirkung (Salam-Weinberg-Theorie) kann deshalb die Ladungskonjugation keine Symmetrie sein.

Für ein freies Dirac-Feld der Masse m gilt (siehe QFT I Abschnitt 6.3.2):

$$\begin{aligned}(\Omega, \psi(x)\bar{\psi}(y)\Omega) &= S_+(x-y, m) \\ (\Omega, \psi(x)\psi(y)^T\Omega) &= 0\end{aligned}$$

Auf dem Fockraum existiert ein unitärer Operator U , der die Symmetrieoperation an dem Feld ausführt, oder, wie man auch sagt, der die Symmetrie *implementiert*:

$$U\psi(x)U^{-1} = \psi^c(x) \quad U\Omega = \Omega$$

Die Existenz von U führt den Relationen

$$(\Omega, \psi(x)\psi^c(y)^T\Omega) = (\Omega, \psi^c(x)\psi(y)^T\Omega) \quad (374)$$

$$(\Omega, \psi^c(x)\psi^c(y)^T\Omega) = 0 \quad (375)$$

Beachten wir $\psi^c(y)^T = -\bar{\psi}(y)C$, so können wir zusammenfassend schreiben:

$$(\Omega, \Psi(x)\Psi(y)^T\Omega) = \begin{pmatrix} 0 & -S_+(x-y, m)C \\ -S_+(x-y, m)C & 0 \end{pmatrix} := W_2(x, y)$$

Hier betrachten wir $W_2(x, y)$ als eine 8×8 -Matrix auf mit den Elementen

$$W_2(x, y)_{ab} = (\Omega, \Psi_a(x)\Psi_b(y)\Omega) \quad (a, b = 1, \dots, 8)$$

Allgemein lassen sich die n -Punktfunktionen

$$W_n(x_1, \dots, x_n)_{a_1 \dots a_n} = (\Omega, \Psi_{a_1}(x_1) \cdots \Psi_{a_n}(x_n)\Omega) \quad (376)$$

als Tensoren auffassen. Wegen des Fermi-Charakters des Feldes verschwinden alle W_n für ungerades n . Handelt es sich speziell um ein freies Feld, so gilt die Rekursionsformel

$$\begin{aligned}W_n(x_1, \dots, x_n)_{a_1 \dots a_n} = \\ \sum_{i=1}^{n-1} (-1)^{i+1} W_{n-2}(x_1, \dots, \hat{x}_i, \dots, x_{n-1})_{a_1 \dots \hat{a}_i \dots a_{n-1}} W_2(x_i, x_n)_{a_i a_n} \quad (377)\end{aligned}$$

die man in gleicher Weise ableitet, wie die entsprechende Formel für ein Bose-Feld. Charakteristisch für das Fermi-Feld ist, daß die einzelnen Beiträge ein alternierendes Vorzeichen bekommen. Dieses Vorzeichen entsteht durch die Verwendung von Antivertauschungsrelationen.

7.2 Das euklidische Dirac-Feld

Um das Wesen des Überganges zum euklidischen Kontinuum zu begreifen, bleiben wir bei den Formeln für das freie Dirac-Feld. Es gilt

$$S_+(x, m) = (i\gamma_M^\mu \partial_\mu + m)\Delta_+(x, m) \quad (x \in M_4) \quad (378)$$

wobei wir mit γ_M^μ die gewöhnlichen Dirac-Matrizen für den Minkowski-Raum bezeichnet haben. Bei einer Ersetzung $ix^0 \rightarrow x^4$ ist es zweckmäßig, zu *euklidischen* γ -Matrizen überzugehen:

$$\gamma^k = -i\gamma_M^k \quad (k = 1, 2, 3) \quad \gamma^4 = \gamma_M^0 \quad (379)$$

Wir machen wieder Gebrauch von der Abkürzung $\not{\partial} = \gamma^k \partial_k$ für die Ableitungen nach Koordinaten $x \in E_4$. Dadurch erhält die euklidische Zweipunkt-funktion die Gestalt

$$S_2(x, y) = \begin{pmatrix} 0 & (\not{\partial} - m)C \\ (\not{\partial} - m)C & 0 \end{pmatrix} S(x - y, m) \quad (380)$$

($x, y \in E_4$, die Funktion $S(x, m)$ wurde im Abschnitt 3.2 vorgestellt), und die neuen γ -Matrizen erfüllen die Relation

$$\gamma^k \gamma^\ell + \gamma^\ell \gamma^k = \delta^{k\ell} \quad k, \ell = 1, \dots, 4 \quad (381)$$

Diese Relation sagt, daß es sich hierbei um die Erzeuger einer Clifford-Algebra (über dem reell-linearen Raum E_4) handelt. Für die von uns benutzte Darstellung der Dirac-Matrizen gilt $\gamma^{k*} = \gamma^k$.

Aus $S(x - y, m) = S(y - x, m)$ und $((\not{\partial} - m)C)^T = (\not{\partial} + m)C$ (eine Konsequenz der Relationen $C^T = -C$ und $(\gamma^\mu C)^T = \gamma^\mu C$) erhalten wir die *Antisymmetrie* der euklidischen Zweipunkt-funktion:

$$S_2(x, y) = -S_2(y, x)^T \quad (382)$$

Diese Eigenschaft ist entscheidend für die Konstruktion des euklidischen Dirac-Feldes $\Psi(x)$, weil sie dazu führt, daß

$$\Psi_a(x)\Psi_b(y) = -\Psi_b(y)\Psi_a(x) \quad (383)$$

gilt. Grund: die Rekursionsformel

$$S_n(x_1, \dots, x_n)_{a_1 \dots a_n} = \sum_{i=1}^{n-1} (-1)^{i+1} S_{n-2}(x_1, \dots, \hat{x}_i, \dots, x_{n-1})_{a_1 \dots \hat{a}_i \dots a_{n-1}} S_2(x_i, x_n)_{a_i a_n} \quad (384)$$

zusammen mit der Antisymmetrie der Zweipunktfunktion führt zur Antisymmetrie der n -Punktfunktion:

$$S_n(x_1, \dots, x_n)_{a_1 \dots a_n} = \text{sgn} \pi S_n(x_{\pi(1)}, \dots, x_{\pi(n)})_{a_{\pi(1)} \dots a_{\pi(n)}} \quad (385)$$

($\pi =$ beliebige Permutation von $1, 2, \dots, n$). Die an Beispielen gewonnene Erkenntnis dient uns zur allgemeinen Grundlage:

Euklidische Fermi-Felder besitzen antisymmetrische, Bose-Felder symmetrische Schwinger-Funktionen.

Wir möchten Bose- und Fermi-Felder in gleicher Weise mit den Methoden der *kommutativen* Algebra behandeln. Das ist nur dann möglich, wenn durch Integration mit geeigneten Quellfunktionen $\eta^a(x)$ die Fermi-Felder $\Psi_a(x)$ zu kommutierenden Größen gemacht werden. Dies verlangt, daß sowohl die $\eta^a(x)$ als auch die $\Psi_a(x)$ erzeugende Elemente einer *gemeinsamen* Grassmann-Algebra A sind:

$$\eta^a(x)\eta^b(y) + \eta^b(y)\eta^a(x) = 0 \quad (386)$$

$$\eta^a(x)\Psi_b(y) + \Psi_b(y)\eta^a(x) = 0 \quad (387)$$

$$\Psi_a(x)\Psi_b(y) + \Psi_b(y)\Psi_a(x) = 0 \quad (388)$$

($a, b = 1, \dots, 8$). In einem gewissen, noch zu erläuternden Sinne sind die Feldvariablen *dual* zu den Quellfunktionen, und wir könnten diese Tatsache durch die Schreibweise $\eta_a^*(x) = \Psi_a(x)$ unterstreichen.

Wir definieren

$$\Psi(\eta) = \int d^4x \Psi_a(x)\eta^a(x) = - \int d^4x \eta^a(x)\Psi_a(x)$$

und erhalten so eine (nahezu) klassische Größe; denn sie kommutiert mit allen Elementen der Grassmann-Algebra. Erwartungswerte können ähnlich wie im Fall der Bose-Felder definiert werden. Die Kenntnis des n -ten Momentes $\langle \Psi(\eta)^n \rangle$ gibt uns vollständigen Aufschluß über die n -Punktfunktion des Feldes, und, falls es sich um ein freies Feld handelt, können die Momente genau wie im Bose-Fall aus einem Gaußischen Funktional hergeleitet werden:

$$E\{\eta\} = \exp(-S\{\eta\}) = 1 + \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n!} \langle \Psi(\eta)^n \rangle \quad (389)$$

$$S\{\eta\} = \frac{1}{2} \int d^4x \int d^4y S_2(x, y)_{ab} \eta^a(x)\eta^b(y) \quad (390)$$

Im Falle des freien Skalarfeldes war $S_2(x, y)$ der Integralkern eines inversen Differentialoperators. Ist das hier auch so? Wir setzen

$$\mathcal{F}_0 = \begin{pmatrix} 0 & C(\not{\partial} + m) \\ C(\not{\partial} + m) & 0 \end{pmatrix} \quad (391)$$

und finden

$$\mathcal{F}_0^{-1} = \begin{pmatrix} 0 & (\not{\partial} - m)C \\ (\not{\partial} - m)C & 0 \end{pmatrix} (-\Delta + m^2)^{-1} \quad (392)$$

Für den Integralkern von \mathcal{F}_0^{-1} erhalten wir somit

$$\mathcal{F}_0^{-1}(x, y) = \begin{pmatrix} 0 & (\not{\partial} - m)C \\ (\not{\partial} - m)C & 0 \end{pmatrix} S(x - y, m) = S_2(x, y)$$

Wir können daher schreiben:

$$S\{\eta\} = \frac{1}{2}(\eta, \mathcal{F}_0^{-1}\eta) \equiv \frac{1}{2} \int d^4x \eta^a(x) [\mathcal{F}_0^{-1}\eta]_a(x) \quad (393)$$

Die Operatoren \mathcal{F}_0 und \mathcal{F}_0^{-1} sind *antisymmetrisch* in dem folgenden Sinne: wären u und v gewöhnliche Funktionen mit Werten in \mathbb{C}^8 , so wären $(u, \mathcal{F}_0 v)$ und $(u, \mathcal{F}_0^{-1} v)$ antisymmetrische Bilinearformen in u, v . Später, nämlich im Abschnitt 6.5.4, wird gezeigt, daß die Fourier-Laplace-Transformation für ein Gauß-Funktional des neuen Typs durchgeführt werden kann und daß wir eine Darstellung der folgenden Art besitzen³⁴:

$$E\{\eta\} = \exp\{-\frac{1}{2}(\eta, \mathcal{F}_0^{-1}\eta)\} = \frac{\int \mathcal{D}\Psi \exp(\Psi(\eta) - W\{\Psi\})}{\int \mathcal{D}\Psi \exp(-W\{\Psi\})} \quad (394)$$

mit der euklidischen Wirkung W eines freien Dirac-Feldes:

$$\begin{aligned} W\{\Psi\} &= W\{\psi, \bar{\psi}\} = \frac{1}{2}(\Psi, \mathcal{F}_0 \Psi) \equiv \frac{1}{2} \int d^4x \Psi_a(x) [\mathcal{F}_0 \Psi]^a(x) \\ &= \frac{1}{2} \int d^4x \{ \psi(x)^T C(\not{\partial} + m) \psi^c(x) + \psi^c(x)^T C(\not{\partial} + m) \psi(x) \} \\ &= \int d^4x \bar{\psi}(x) (\not{\partial} + m) \psi(x) \end{aligned} \quad (395)$$

Dabei haben wir den euklidischen Bispinor Ψ wieder in gewöhnliche Spinoren zerlegt:

$$\Psi = \begin{pmatrix} \psi \\ \psi^c \end{pmatrix} \quad \psi^c(x) = C\bar{\psi}(x)^T \quad (396)$$

³⁴Wir machen nun keinen Unterschied mehr zwischen dem Feld Ψ und den "Pfad" des Feldes, über die integriert wird.

An dieser Stelle wird nun deutlich, daß die euklidische Version der Dirac-Theorie sich von der Formulierung im Minkowski-Raum schon dadurch unterscheidet, daß auf dem Raum E_4 die Spinoren ψ und $\bar{\psi}$ (äquivalent ψ und ψ^c) als *unabhängige* dynamische Variable eingeführt werden. Neben der sehr kompakten Formulierung (394) kann man selbstverständlich auch zu einer Beschreibung zurückkehren, die das gewohnte Bild der Wirkung, ausgedrückt in ψ und $\bar{\psi}$ enthält. So würden wir für das erzeugende Funktional der n -Punktfunktionen auch schreiben können:

$$\begin{aligned} E\{\eta\} = E\{\zeta, \bar{\zeta}\} &= Z^{-1} \int \mathcal{D}\psi \mathcal{D}\bar{\psi} \exp\{-W\{\psi, \bar{\psi}\} + \bar{\zeta}(\psi) + \bar{\psi}(\zeta)\} \\ Z &= \int \mathcal{D}\psi \mathcal{D}\bar{\psi} \exp\{-W\{\psi, \bar{\psi}\}\} \\ \bar{\zeta}(\psi) + \bar{\psi}(\zeta) &= \int d^4x \{\bar{\zeta}(x)\psi(x) + \bar{\psi}(x)\zeta(x)\} \end{aligned}$$

Hierbei sind ζ und $\bar{\zeta}$ *unabhängige* antikommutierende Dirac-Spinoren. Die Formeln

$$\eta = \begin{pmatrix} 0 & C \\ C & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \zeta \\ \zeta^c \end{pmatrix} \quad \zeta^c(x) = C\bar{\zeta}(x)^T \quad (397)$$

stellen den Zusammenhang zwischen den beiden Beschreibungen her.

Eine naheliegende Erweiterung besteht darin, daß wir, den Vorschriften der Eichtheorien folgend, eine Ankopplung an ein Vektorpotential $A_k(x)$ vornehmen. Zum Beispiel geht die euklidische QED von der folgenden Wirkung aus:

$$W\{\Psi, A\} = \int d^4x \left\{ \frac{1}{4} F^{k\ell} F_{k\ell} + \bar{\psi}(\not{\partial} + m + iq\mathcal{A})\psi \right\} \quad (398)$$

$$= \int d^4x \left\{ \frac{1}{4} F^{k\ell} F_{k\ell} + \frac{1}{2}(\Psi, \mathcal{F}_A \Psi) \right\} \quad (399)$$

mit dem antisymmetrischen Operator

$$\mathcal{F}_A = \begin{pmatrix} 0 & C(\not{\partial} + m - iq\mathcal{A}) \\ C(\not{\partial} + m + iq\mathcal{A}) & 0 \end{pmatrix} \quad (400)$$

In jedem Fall erhalten wir eine Wirkung, die bilinear in den Dirac-Feldern ist. Das korrespondierende Gaußsche Funktionalintegral ist stets ausführbar und führt auf das erzeugende Funktional

$$\exp\left\{-\frac{1}{2}(\eta, \mathcal{F}_A^{-1}\eta)\right\} = \exp \int d^4x \bar{\zeta}(x)(\not{\partial} + m + iq\mathcal{A})^{-1}\zeta(x) \quad (401)$$

mit

$$\mathcal{F}_A^{-1} = \begin{pmatrix} 0 & -(\not{\partial} + m + iqA)^{-1}C \\ -(\not{\partial} + m - iqA)^{-1}C & 0 \end{pmatrix} \quad (402)$$

Die nachfolgende Integration über das Potential A ist dann nicht mehr elementar ausführbar.

In den folgenden Abschnitten befassen wir uns näher mit der Mathematik, die der Einführung von η und Ψ als Größen einer Grassmann-Algebra zugrunde liegen. Insbesondere möchten wir die Integralformeln rechtfertigen, von denen wir bereits Gebrauch gemacht haben.

7.3 Grassmann-Algebren

Wir wollen die klassische Konstruktion von Grassmann-Algebren vorstellen und gehen von einem n -dimensionalen komplexen Vektorraum E aus. Eine Abbildung

$$S : \underbrace{E \times \cdots \times E}_p \longrightarrow \mathbb{C}$$

heißt *p-linear*, wenn $S(u_1, \dots, u_n)$ in jedem Argument $u_k \in E$ linear ist. Sie heißt *antisymmetrisch*, wenn für jede Permutation π von $\{1, \dots, p\}$ gilt:

$$S(u_{\pi(1)}, \dots, u_{\pi(p)}) = \text{sgn}\pi S(u_1, \dots, u_p) \quad (403)$$

Mit $A^p(E)$ bezeichnen wir den Raum der p -linearen antisymmetrischen Funktionen über E . Da man Elemente von $A^p(E)$ addieren und mit komplexen Zahlen multiplizieren kann, besitzt $A^p(E)$ die Struktur eines Vektorraumes. Man setzt $A^0(E) = \mathbb{C}$ und zeigt:

$$\dim A^p(E) = \binom{n}{p} \quad 0 \leq p \leq n \quad (404)$$

$$A^p(E) = 0 \quad p > n \quad (405)$$

Ein Produktabbildung $A^p(E) \times A^q(E) \rightarrow A^{p+q}(E)$ ist dadurch erklärt, daß wir jedem Vektor $T \in A^p$ und jedem Vektor $T \in A^q$ einen Vektor $ST \in A^{p+q}$ zuordnen vermöge der Vorschrift

$$ST(u_1, \dots, u_{p+q}) = \frac{1}{p!q!} \sum_{\pi} \text{sgn}\pi S(u_{\pi(1)}, \dots, u_{\pi(p)}) T(u_{\pi(p+1)}, \dots, u_{\pi(p+q)}) \quad (406)$$

(die Summe erstreckt sich über alle Permutationen von $\{1, \dots, p+q\}$). Man bezeichnet ST als das *Grassmann-Produkt* von S und T . Das Assoziativgesetz

$R(ST) = (RS)T$ ist sicher erfüllt; anstelle des Kommutativgesetzes haben wir jedoch nur die Regel

$$ST = (-1)^{pq}TS \quad \text{falls } S \in A^p, T \in A^q \quad (407)$$

Dies folgt, weil für die Permutation π , die $(1, \dots, p, p+1, \dots, p+q)$ in $(p+1, \dots, p+q, 1, \dots, p)$ überführt, $\text{sgn}\pi = (-1)^{pq}$ gilt.

Indem wir das Grassmann-Produkt erklärt haben, wird die direkte Summe

$$A(E) = \bigoplus_{p=0}^n A^p(E)$$

von Vektorräumen zu einer Algebra. Man nennt $A(E)$ die *Grassmann-Algebra über dem Vektorraum E* . Ein Element der Algebra ist demnach eine Summe $S_0 + S_1 + \dots + S_n$ mit $S_p \in A^p(E)$. Aus $\sum_p \binom{n}{k} = 2^n$ folgt

$$\dim A(E) = 2^{\dim E} \quad (408)$$

Man kann A immer in einen geraden und einen ungeraden Anteil zerlegen:

$$\begin{aligned} A &= A_+ + A_- \\ A_+ &= A^0 \oplus A^2 \oplus \dots \quad (\text{gerader Anteil}) \\ A_- &= A^1 \oplus A^3 \oplus \dots \quad (\text{ungerader Anteil}) \end{aligned}$$

Aus (407) folgt dann die Regel

$$ST = \begin{cases} TS & S \in A_+ \text{ oder } T \in A_+ \\ -TS & S \in A_- \text{ und } T \in A_- \end{cases} \quad (409)$$

Insbesondere gilt:

Der gerade Anteil A_+ ist eine kommutative Unteralgebra von A .

Dadurch ist es möglich, viele Funktionen auf A_+ zu erklären (Polynome, die Exponentialfunktion etc.), und zwar in eindeutiger Weise. Da man solche Funktionen addieren und miteinander multiplizieren kann, spricht man von einem *Funktionskalkül* auf A_+ . Sogar die üblichen Funktionalgleichungen lassen sich übertragen; z.B. gilt

$$e^S e^T = e^{S+T} \quad S, T \in A_+ \quad (410)$$

In vieler Hinsicht verhalten sich die Elemente von A_+ wie gewöhnliche Zahlen, nur die Existenz eines inversen Elementes ist i.allg. nicht gewährleistet.

Beispiel: Es sei $S \in A^2$. Dann existieren alle Potenzen

$$S^m = \underbrace{SS \cdots S}_m \in A^{2m}$$

mit positiven Exponenten m , und es gilt überdies $S^m = 0$ für $2m > n$. Jedoch S^{-m} ist ein sinnloser Ausdruck: keine der Potenzen S^m ist invertierbar. Man vereinbart $S^0 = 1 \in A^0$. Für die Exponentialfunktion

$$e^{-S} = \sum_{m \geq 0} \frac{(-1)^m}{m!} S^m \in A_+$$

(eine endliche Reihe!) findet man hingegen ein inverses Element, nämlich e^S . Denn es gilt $e^{-S}e^S = 1$.

Nun sei $(e_i)_{i=1, \dots, n}$ eine Basis in dem Vektorraum E . Ein Vektor $u \in E$ besitzt dann die Darstellung $\sum u^i e_i$ mit $u^i \in \mathbb{C}$. Wir definieren spezielle Elemente $\eta^i \in A^1$:

$$\eta^i(u) = u^i \quad i = 1, \dots, n \quad u \in E \text{ beliebig} \quad (411)$$

d.h. η^i ordnet jedem Vektor $u \in E$ seine i -te Komponente zu. Die folgenden Eigenschaften sind elementar und drücken unter anderem aus, daß die η^i die gesamte Grassmann-Algebra erzeugen:

1. Es gelten die Kommutatorrelationen

$$\eta^i \eta^k + \eta^k \eta^i = 0 \quad i, k = 1, \dots, n \quad (412)$$

2. Jeder Vektor $S \in A^p$ besitzt eine Darstellung der Art

$$S = \frac{1}{p!} \sum_{i_1 \dots i_p} s_{i_1 \dots i_p} \eta^{i_1} \cdots \eta^{i_p} \quad (413)$$

mit komplexen Koeffizienten $s_{i_1 \dots i_p}$.

Das Schema der Koeffizienten von S ist stets *antisymmetrisch* unter Permutationen der Indizes.

Beispiel: Nach Wahl einer Basis in E liegt jedes Element $S \in A^2(E)$ in der Form

$$S = \frac{1}{2} \sum_{ik} s_{ik} \eta^i \eta^k \quad s_{ik} = -s_{ki} \in \mathbb{C} \quad (414)$$

vor. Umgekehrt ist jeder komplexen antisymmetrischen $n \times n$ -Matrix ein Element $S \in A^2(E)$ zugeordnet. Darüberhinaus existiert

$$e^{-S} = \sum_{m \geq 0} \frac{(-1)^m}{m!} S^m \quad (415)$$

wobei durch

$$\frac{1}{m!} S^m = \frac{1}{m!} \left(\frac{1}{2} \sum_{ik} s_{ik} \eta^i \eta^k \right)^m = \frac{1}{(2m)!} \sum_{i_1 \dots i_{2m}} s_{i_1 \dots i_{2m}} \eta^{i_1} \dots \eta^{i_{2m}} \quad (416)$$

ein antisymmetrisches Koeffizientensystem $s_{i_1 \dots i_{2m}}$ gegeben ist, für das man mit einiger Mühe die Rekursionsformel

$$s_{i_1 \dots i_{2m}} = \sum_{p=1}^{2m-1} (-1)^{p+1} s_{i_1 \dots \hat{i}_p \dots i_{2m-1}} s_{i_p i_{2m}} \quad (417)$$

nachweist. Formeln dieser Art sind uns bereits bei der Diskussion des euklidischen Dirac-Feldes begegnet. Wir erkennen jetzt, daß der Formalismus der Grassmann-Algebra geeignet ist, schwierige kombinatorische Sachverhalte auf elegante Weise zu beschreiben.

Legen wir dem Dirac-Feld das Kontinuum E_4 zugrunde (also kein Gitter), so sind wir gezwungen, die Algebra $A(E)$ über einem ∞ -dimensionalen Vektorraum E zu konstruieren, nämlich über einem Raum von Testfunktionen

$$f : E_4 \rightarrow \mathbb{C}^8$$

(zur Erinnerung: das Feld hat acht unabhängige Komponenten). Eine zulässige Wahl wäre der Schwartz-Raum $E = \mathcal{S}(E_4, \mathbb{C}^8)$. Wir fassen die Funktionswerte $f^a(x)$ ($a = 1, \dots, 8$, $x \in E_4$) als die *Koordinaten* des Vektors f auf und definieren die Erzeuger $\eta^a(x)$ der Grassmann-Algebra $A(E)$ durch

$$\eta^a(x)(f) = f^a(x) \quad (418)$$

Das Paar (a, x) ist hier an die Stelle des Index i getreten. Es gelten die Relationen

$$\eta^a(x) \eta^b(y) + \eta^b(y) \eta^a(x) = 0 \quad (419)$$

Im Abschnitt 6.2 haben wir dem freien Dirac-Feld die Zweipunktfunktion $S_2(x, y)_{ab}$ zugeordnet und mit ihrer Hilfe ein Element der Algebra $A_+(E)$ konstruiert:

$$S = \frac{1}{2} \int d^4x \int d^4y S_2(x, y)_{ab} \eta^a(x) \eta^b(y) \quad (420)$$

Genauer: S liegt in $A^2(E)$. Der entscheidende Schritt bestand darin, ein weiteres Element der Algebra $A_+(E)$ zu definieren:

$$\begin{aligned} e^{-S} &= 1 + \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n!} \langle \Psi(\eta)^n \rangle = \\ &1 + \sum_{m=1}^{\infty} \frac{(-1)^m}{(2m)!} \int d^4x_1 \dots \int d^4x_{2m} \langle \Psi_{a_1}(x_1) \dots \Psi_{a_{2m}}(x_{2m}) \rangle \eta^{a_1}(x_1) \dots \eta^{a_{2m}}(x_{2m}) \end{aligned}$$

Die n -Punktfunktionen des freien Dirac-Feldes erweisen sich somit als die Entwicklungskoeffizienten von $e^{-S} \in A_+(E)$ nach den Erzeugern $\eta^a(x)$.

7.4 Formale Ableitungen

In der Analysis benutzt man den Begriff der Ableitung im Sinne einer Differentiation nach reellen Variablen, und in der Funktionentheorie führt man Ableitungen nach komplexen Größen ein. Damit sind die Möglichkeiten, den Begriff auf andere Bereiche auszudehnen, bei weitem nicht erschöpft. In der klassischen Mechanik begegnen wir der Poisson-Klammer $\{F, H\}$ mit den charakteristischen Eigenschaften

- $\{FG, H\} = \{F, H\}G + F\{G, H\}$
- $\{F, H\} = 0$ falls $F = \text{konst.}$

In der Quantenmechanik übernimmt diese Rolle der Kommutator $[F, H]$ mit vergleichbaren Eigenschaften. Die bisher genannten Beispiele illustrieren den Begriff der *Derivation* einer Algebra.

Auch in einer Grassmann-Algebra kann man Ableitungen bilden. Wir gehen dabei wieder von einem Vektorraum E aus und erklären für beliebiges $u \in E$ eine lineare Abbildung

$$d_u : A^p(E) \rightarrow A^{p-1}(E)$$

durch die Vorschrift

$$(d_u S)(u_2, \dots, u_p) = S(u, u_2, \dots, u_p) \quad (421)$$

für alle $S \in A^p$. Wir vereinbaren: $d_u S = 0$ falls $S \in A^0$. Der Operator d_u wird so zu einer linearen Abbildung $A \rightarrow A$. Nach Wahl einer Basis in E besitzen wir Darstellungen der Art

$$S(u_1, \dots, u_p) = \sum_{i_1 \dots i_p} s_{i_1 \dots i_p} u_1^{i_1} \dots u_p^{i_p} \quad (422)$$

$$(d_u S)(u_2, \dots, u_p) = \sum_{i_2 \dots i_p} s'_{i_2 \dots i_p} u_2^{i_2} \dots u_p^{i_p} \quad (423)$$

mit

$$s'_{i_2 \dots i_p} = \sum_{i_1} s_{i_1 \dots i_p} u^{i_1} \quad (424)$$

Eine dritte Weise, die Wirkung des Operators d_u zu beschreiben, erhält man durch Einführung der Erzeuger η^i :

$$S = \frac{1}{p!} \sum_{i_1 \dots i_p} s_{i_1 \dots i_p} \eta^{i_1} \dots \eta^{i_p} \quad (425)$$

$$d_u S = \frac{1}{(p-1)!} \sum_{i_1 \dots i_p} s_{i_1 \dots i_p} u^{i_1} \eta^{i_2} \dots \eta^{i_p} \quad (426)$$

In der Feldtheorie sind wir dem Operator d_u schon einmal bei der Diskussion des Fock-Raumes der Fermionen begegnet: dort war E der Einteilchenraum, $A(E)$ die Algebra der Erzeugungsoperatoren (wir schrieben a_i^\dagger anstelle von η^i) und d_u übernahm die Rolle eines Vernichtungsoperators (wir schrieben a_i anstelle von d_{e_i}).

Gilt die Produktregel für Ableitungen? Wir finden eine leicht modifizierte Regel, nämlich

$$d_u(ST) = (d_u S)T + (-1)^p S(d_u T) \quad S \in A^p, T \in A \quad (427)$$

Wegen des p -abhängigen Vorzeichens heißt d_u eine *Antiderivation* der Algebra A ; d_u hängt in linearer Weise von u ab, so daß wir – nach Wahl einer Basis – schreiben können:

$$d_u = \sum_i u^i \frac{\partial}{\partial \eta^i}$$

Diese Bezeichnung liegt in der Tat sehr nahe, weil man den Inhalt von (426) nun so wiedergeben kann:

$$\frac{\partial}{\partial \eta^i} \sum_{i_1 \dots i_p} s_{i_1 \dots i_p} \eta^{i_1} \dots \eta^{i_p} = p \sum_{i_2 \dots i_p} s_{i i_2 \dots i_p} \eta^{i_2} \dots \eta^{i_p} \quad (428)$$

Man macht sich leicht klar, daß die formale Ableitung durch die folgenden Regeln bereits vollständig charakterisiert ist.

Regel 1 $\frac{\partial}{\partial \eta^i}(\alpha S + \beta T) = \alpha \frac{\partial}{\partial \eta^i} S + \beta \frac{\partial}{\partial \eta^i} T \quad (\alpha, \beta \in \mathbb{C})$

Regel 2 $\frac{\partial}{\partial \eta^i} 1 = 0$

Regel 3 $\frac{\partial}{\partial \eta^i}(\eta^k S) = \delta_i^k S - \eta^k \frac{\partial}{\partial \eta^i} S$

Hierin sind S und T beliebige Elemente der Algebra. Im Gegensatz zur klassischen Analysis gilt in einer Grassmann-Algebra:

$$\frac{\partial^2}{\partial \eta^i \partial \eta^k} = -\frac{\partial^2}{\partial \eta^k \partial \eta^i} \quad \text{insbesondere} \quad \left(\frac{\partial}{\partial \eta^i} \right)^2 = 0 \quad (429)$$

Nun sei speziell S ein *gerades* Element der Algebra, d.h. $S \in A_+$. In diesem Fall ergeben unsere Regeln:

$$\frac{\partial}{\partial \eta^i} S^m = \frac{\partial}{\partial \eta^i} (\underbrace{S S \cdots S}_m) = \sum_{k=1}^m S^{k-1} \left(\frac{\partial}{\partial \eta^i} S \right) S^{m-k} = m S^{m-1} \frac{\partial}{\partial \eta^i} S$$

Denn $S \in A_+$ und $\frac{\partial}{\partial \eta^i} S \in A_-$ kommutieren. Was wir hier für Potenzen gefunden haben, läßt sich auf Potenzreihen $f(S) = \sum a_m S^m$ ($a_m \in \mathbb{C}$) ausdehnen, d.h. für alle $S \in A_+$ gilt

$$\frac{\partial}{\partial \eta^i} f(S) = f'(S) \frac{\partial}{\partial \eta^i} S \quad (430)$$

Rechts steht das Produkt zweier Elemente der Algebra, wobei das erste in A_+ , das zweite in A_- liegt. Dennoch ist die Reihenfolge der Faktoren gleichgültig.

Eine einfache Anwendung betrifft die Exponentialfunktion:

$$\frac{\partial}{\partial \eta^i} e^{-S} = -e^{-S} \frac{\partial}{\partial \eta^i} S \quad (S \in A_+) \quad (431)$$

Mit

$$S = \frac{1}{2}(\eta, \mathcal{F}_A^{-1} \eta) = \frac{1}{2} \int d^4x \int d^4y S_2(x, y; A)_{ab} \eta^a(x) \eta^b(y) \quad (432)$$

für ein Potential $A_k(x)$ erhielten wir

$$e^S \frac{\partial^2}{\partial \eta^a(x) \partial \eta^b(y)} e^{-S} = S_2(x, y; A)_{ab} \quad (433)$$

7.5 Formale Integration

7.5.1 Integrale über $A(E)$

Wir möchten einen geeigneten Integralbegriff in die Grassmann-Algebra einführen, der ebenso wie die Ableitung *rein algebraisch* aufzufassen ist. Wir gehen dabei nicht von der Vorstellung aus, die dem unbestimmten Integral zugrunde

liegt, nämlich, daß das Integral eine Art Umkehrung der Differentiation sein sollte. Vielmehr suchen wir, das Grassmann-Integral $\int d\eta S$ in Analogie zum gewöhnlichen Volumenintegral zu definieren.

Es sei also $\dim E = n < \infty$ und $S \in A(E)$ vorausgesetzt. Wir fordern:

1. Das Integral $\int d\eta S$ ist eine komplexe Zahl.
2. Die Abbildung $A(E) \rightarrow \mathbb{C}$, $S \mapsto \int d\eta S$ ist linear.
3. Es gilt $\int d\eta \frac{\partial}{\partial \eta^i} S = 0$ für $i = 1, \dots, n$.
4. Normierung: $\int d\eta \eta^1 \eta^2 \cdots \eta^n = 1$.

Das Integral ist also ein lineares Funktional auf der Algebra mit besonderen Eigenschaften. Wir zeigen die Existenz eines solchen Funktionals dadurch, daß wir jedes Element $S \in A(E)$ in kanonischer Weise zerlegen:

$$S = S_0 + S_1 + \cdots + S_n \quad S_p \in A^p(E) \quad (434)$$

Speziell haben wir immer eine Darstellung der Art

$$S_n = I \eta^1 \eta^2 \cdots \eta^n \quad I \in \mathbb{C} \quad (435)$$

$$I = \frac{\partial}{\partial \eta^n} \cdots \frac{\partial}{\partial \eta^2} \frac{\partial}{\partial \eta^1} S \quad (436)$$

Denn $\dim A^n = \binom{n}{n} = 1$. Sodann definieren wir

$$\boxed{\int d\eta S = I} \quad (437)$$

Die Bedingungen 1.-4. werden nur durch diesen Ansatz erfüllt. Wir verzichten auf den Beweis und wenden uns rasch den Eigenschaften des Integrals zu:

1. Formel (partielle Integration):

$$\int d\eta \left(\frac{\partial}{\partial \eta^i} S \right) T = (-1)^{p+1} \int d\eta S \frac{\partial}{\partial \eta^i} T \quad S \in A^p, T \in A \quad (438)$$

Dies folgt aus $\int d\eta \frac{\partial}{\partial \eta^i} (ST) = 0$ und der Produktregel für Ableitungen.

Die nächste Regel betrifft das Transformationsverhalten des Integrals unter einer linearen Abbildung $a : E \rightarrow E$. Durch

$$S^a(u_1, \dots, u_p) = S(au_1, \dots, au_p)$$

ist eine Wirkung von a auf A^p erklärt, die man zu einer linearen Abbildung $A \rightarrow A$, $S \mapsto S^a$ ausdehnen kann. In bezug auf eine Basis schreiben wir

$$(au)^i = \sum_k a_k^i u^k \quad (a\eta)^i = \sum_k a_k^i \eta^k \quad (439)$$

und erhalten

$$S^a = \frac{1}{p!} \sum s_{i_1 \dots i_p} (a\eta)^{i_1} \dots (a\eta)^{i_p} \quad (440)$$

Es erweist sich als bequem, die Schreibweise $S = S\{\eta\}$ zu benutzen. Dann gilt $S^a = S\{a\eta\}$. Ein besonderer Fall tritt für $p = n = \dim E$ ein. Ist nämlich $S \in A^n$, so gilt $S\{a\eta\} = \det a S\{\eta\}$, wenn wir (435) beachten. Daraus folgt die

2. Formel: Für alle $S \in A$ gilt

$$\int d\eta S\{a\eta\} = \det a \int d\eta S\{\eta\} \quad (441)$$

Beachte: in der gewöhnlichen Analysis gilt

$$\int d^n x f(ax) = (\det a)^{-1} \int d^n x f(x)$$

wobei wir überdies noch die Bedingung benötigen, daß a nichtsingulär ist.

7.5.2 Integrale über $A(E \oplus F)$

Nun habe der Vektorraum die Struktur einer direkten Summe $E \oplus F$ (dieser Fall wird im Zusammenhang mit dem Dirac-Feld wichtig werden). Vektoren in diesem Raum sind Paare (u, v) mit $u \in E$ und $v \in F$. Es sei (e_i) eine Basis in E und (f_k) eine Basis in F . Wir definieren die Erzeuger der Grassmann-Algebra $A(E \oplus F)$:

$$\eta^i(u, v) = u^i \quad (u = \sum u^i e_i) \quad (442)$$

$$\zeta^k(u, v) = v^k \quad (v = \sum v^k f_k) \quad (443)$$

Alle Antikommutatoren der Erzeuger verschwinden identisch. Wir verstehen $A(E)$ und $A(F)$ als zwei Unteralgebren von $A(E \oplus F)$, erzeugt von den η^i bzw. ζ^k . Ein allgemeines Element der Algebra $A(E \oplus F)$ besitzt eine Entwicklung nach *allen* Erzeugern, η^i und ζ^k . Für ein solches Element schreiben wir daher $S\{\eta, \zeta\}$ und definieren Teilintegrale

$$\int d\eta S\{\eta, \zeta\} = \frac{\partial}{\partial \eta^n} \dots \frac{\partial}{\partial \eta^2} \frac{\partial}{\partial \eta^1} S\{\eta, \zeta\} \quad n = \dim E \quad (444)$$

und

$$\int d\zeta S\{\eta, \zeta\} = \frac{\partial}{\partial \zeta^m} \cdots \frac{\partial}{\partial \zeta^2} \frac{\partial}{\partial \zeta^1} S\{\eta, \zeta\} \quad m = \dim F \quad (445)$$

Im ersten Fall ergibt das Teilintegral ein Element in $A(F)$, im zweiten Fall ein Element in $A(E)$. Das vollständige Integral $\int d\eta \int d\zeta S\{\eta, \zeta\}$ entsteht durch Hintereinanderschalten der beiden Prozesse. Hierbei ist es jedoch wichtig, auf die Integrationsreihenfolge zu achten; denn es gilt die Regel

$$\int d\eta \int d\zeta S\{\eta, \zeta\} = (-1)^{nm} \int d\zeta \int d\eta S\{\eta, \zeta\} \quad (446)$$

Für Teilintegrale gilt bezüglich einer linearen Transformation a :

3. Formel:

$$\int d\eta S\{a\eta, \zeta\} = \det a \int d\eta S\{\eta, \zeta\} \quad (447)$$

Ein Sonderfall tritt ein, wenn die Räume E und F die gleiche Dimension n haben und ein Element der Algebra die Form $S\{\eta + \zeta\}$ hat, d.h. es besitzt dann eine Entwicklung nach den Erzeugern $\xi^i = \eta^i + \zeta^i$.

4. Formel: (Translationsinvarianz)

$$\int d\eta S\{\eta + \zeta\} = \int d\eta S\{\eta\} \quad (448)$$

Beweis. Der höchste Term der Entwicklung von $S\{\eta\}$ nach den Erzeugern hat die Form $I\eta^1\eta^2 \cdots \eta^n$ mit $I = \int d\eta S\{\eta\}$. Der höchste Term der Entwicklung von $S\{\eta + \zeta\}$ nach den η^i ist in $I(\eta^1 + \zeta^1) \cdots (\eta^n + \zeta^n)$ enthalten und stimmt mit dem vorigen Ausdruck überein.

7.5.3 Integrale vom Exponentialtyp

Wir nehmen an, daß die Räume E und F die gleiche Dimension n haben.

Satz Für jede komplexe $n \times n$ -Matrix $a = (a_{ik})$ gilt

$$\int d\eta \int d\zeta \exp \sum_{ik} a_{ik} \zeta^i \eta^k = (-1)^{\binom{n}{2}} \det a \quad (449)$$

Beweis. Wir setzen $S\{\eta, \zeta\} = \exp \sum_i \zeta^i \eta^i$ und haben

$$\int d\eta \int d\zeta S\{a\eta, \zeta\} = \det a \int d\eta \int d\zeta S\{\eta, \zeta\}$$

Die kanonische Zerlegung $S = S_0 + \dots + S_n$ führt auf

$$\begin{aligned} S_n &= \frac{1}{n!} \left(\sum_i \zeta^i \eta^i \right)^n \\ &= (\zeta^1 \eta^1) (\zeta^2 \eta^2) \cdots (\zeta^n \eta^n) \\ &= (-1)^{\binom{n}{2}} (\zeta^1 \cdots \zeta^n) (\eta^1 \cdots \eta^n) \end{aligned}$$

Damit folgt $\int d\eta \int d\zeta S\{\eta, \zeta\} = (-1)^{\binom{n}{2}}$.

Definition Es sei $n = 2m$ gerade und $A = (A_{ki})$ eine antisymmetrische $n \times n$ -Matrix. Dann heißt die durch

$$\frac{1}{m!} \left(\frac{1}{2} \sum_{ik} A_{ik} \eta^i \eta^k \right)^m = \text{Pf } A \eta^1 \eta^2 \cdots \eta^n \quad (450)$$

bestimmte komplexe Zahl $\text{Pf } A$ die Pfaffian von A .

Als Funktion der Matrixelemente ist $\text{Pf } A$ homogen vom Grade m . Für niedrige Dimensionen ($n = 2, 4, \dots$) finden wir:

$$\begin{aligned} \text{Pf } A &= A_{12} & m &= 1 \\ \text{Pf } A &= A_{12}A_{34} - A_{13}A_{24} + A_{14}A_{23} & m &= 2 \end{aligned}$$

Als direkte Folge der Definition der Pfaffian erhalten wir die Formel

$$\int d\eta \exp \left(\frac{1}{2} \sum_{ik} A_{ik} \eta^i \eta^k \right) = \text{Pf } A \quad (451)$$

Anmerkung: Das Integral verschwindet, wenn n ungerade ist. Der nächste Satz zeigt einen Zusammenhang zwischen den Begriffen *Determinante* und *Pfaffian*.

Satz. Sei a eine komplexe $m \times m$ -Matrix und a^T die transponierte Matrix. Dann ist

$$A = \begin{pmatrix} 0 & a \\ -a^T & 0 \end{pmatrix} \quad (452)$$

antisymmetrisch und es gilt

$$\text{Pf } A = (-1)^{\binom{m}{2}} \det a \quad (453)$$

Beweis. Man kann schreiben:

$$\sum_{ik} a_{ik} \zeta^i \eta^k = \frac{1}{2} \xi^T A \xi \quad \xi = \begin{pmatrix} \zeta \\ \eta \end{pmatrix}$$

Damit wird

$$\int d\xi \exp \frac{1}{2} \xi^T A \xi = \int d\eta \int d\zeta \exp \zeta^T a \eta$$

und die Behauptung folgt unmittelbar.

Anmerkung: Es existiert ein weiterer leicht beweisbarer Zusammenhang, nämlich

$$\det a = \begin{cases} (\text{Pf } a)^2 & m \text{ gerade} \\ 0 & m \text{ ungerade} \end{cases} \quad (454)$$

für jede antisymmetrische $m \times m$ -Matrix a .

7.5.4 Fourier-Laplace-Transformation

Die klassische Fourier-Transformation verwandelt Funktionen $f(x)$, definiert für Vektoren $x \in E$ (E ein n -dimensionaler reeller Vektorraum), in Funktionen $\tilde{f}(p)$, definiert für $p \in E^*$ (E^* der Dualraum zu E). Ähnliches leistet die beidseitige Laplace-Transformation. Ist der Vektorraum komplex, so besteht kein wesentlicher Unterschied mehr zwischen der Fourier- und der Laplace-Transformation.

Auf einer Grassmann-Algebra führt die FL-Transformation in ähnlicher Weise Elemente $S \in A(E)$ über in Elemente $\tilde{S} \in A(E^*)$. Sie ist eng verbunden mit der in der Algebra häufig benutzten \star -Abbildung oder *Hodge-Abbildung*

$$\star : A^p(E) \rightarrow A^{n-p}(E^*) \quad (n = \dim E), \quad (455)$$

der wir uns zunächst zuwenden. Es sei also (e_i) eine Basis in E und (e_*^i) die induzierte duale Basis in E^* , so daß $\langle e_*^i, e_k \rangle = \delta_k^i$ gilt. Jedes $u \in E$ besitzt die Darstellung $\sum u^i e_i$, jedes $v \in E^*$ die Darstellung $\sum v_i e_*^i$. Wir definieren

$$\begin{aligned} \text{die Erzeuger von } A(E): & \quad \eta^i(u) = u^i \\ \text{die Erzeuger von } A(E^*): & \quad \eta_i^*(v) = v_i \end{aligned}$$

Ein Element $S \in A^p(E)$ besitzt die Gestalt

$$S = \frac{1}{p!} \sum_{i_1 \dots i_p} s_{i_1 \dots i_p} \eta^{i_1} \cdots \eta^{i_p} \quad (456)$$

Die Hodge-Abbildung (455) wird erklärt durch die Vorschrift

$$\star S = \frac{1}{(n-p)!} \sum_{i_{p+1} \dots i_n} s_*^{i_{p+1} \dots i_n} \eta_{i_{p+1}}^* \cdots \eta_{i_n}^* \quad (457)$$

$$s_*^{i_{p+1} \dots i_n} = \frac{1}{p!} \sum_{i_1 \dots i_p} s_{i_1 \dots i_p} \epsilon^{i_1 \dots i_n} \quad (458)$$

(ϵ ist das Levi-Civita-Symbol). Sie hat die Eigenschaft

$$\star \star S = (-1)^{p(n-p)} S \quad S \in A^p(E) \quad (459)$$

Das entstehende Vorzeichen ist p -abhängig. Dehnt man also \star zu einer linearen Abbildung auf ganz $A(E)$ aus, so erhält man keine Involution. Das macht die Hodge-Abbildung für unsere Zwecke ungeeignet.

Mit einer geringfügigen Änderung läßt sich die Sache bereinigen. Wir definieren

$$\tilde{S} = (-1)^\sigma \star S \quad \sigma = \binom{n-p+1}{2} \quad S \in A^p(E) \quad (460)$$

und finden

$$\tilde{\tilde{S}} = (-1)^{\binom{n+1}{2}} S \quad (461)$$

Das Vorzeichen ist unabhängig von p . Wir bezeichnen \tilde{S} als die FL-Transformierte von S .

Die Vorschrift zur Konstruktion von \tilde{S} kann auch auf eine ganz andere Weise gegeben werden. Wir betten hierzu $A(E)$ und $A(E^*)$ in die gemeinsame Algebra $A(E \oplus E^*)$ ein, benutzen die Schreibweise $\langle \eta^*, \eta \rangle := \sum_i \eta_i^* \eta^i = -\sum_i \eta^i \eta_i^*$ und setzen

$$\tilde{S}\{\eta^*\} = \int d\eta S\{\eta\} \exp\langle \eta^*, \eta \rangle \quad (462)$$

Daß auf diese Weise die gleiche Abbildung beschrieben wird, folgt aus dem speziellen Integral

$$\int d\eta \eta^1 \eta^2 \cdots \eta^p \exp\langle \eta^*, \eta \rangle = (-1)^{\binom{n-p+1}{2}} \eta_{p+1}^* \cdots \eta_n^* \quad (463)$$

Wir wollen nun eine konkrete FL-Transformierte berechnen.

Satz *Es sei $A = (A_{ik})$ eine antisymmetrische nichtsinguläre $n \times n$ -Matrix (n ist notwendig gerade). Dann besitzt*

$$S\{\eta\} = \exp \frac{1}{2} \sum A_{ik} \eta^i \eta^k \quad (464)$$

die FL-Transformierte

$$\tilde{S}\{\eta^*\} = \text{Pf } A \exp \frac{1}{2} \sum (A^{-1})^{ik} \eta_i^* \eta_k^* \quad (465)$$

Beweis. Wir schreiben (alle Summanden in $A_+(E \oplus E^*)$)

$$\frac{1}{2}\eta^T A \eta + \langle \eta^*, \eta \rangle = \frac{1}{2}(\eta + \zeta)^T A (\eta + \zeta) + \frac{1}{2}\eta^{*T} A^{-1} \eta^*$$

mit $\zeta = -A^{-1}\eta^*$. Es gilt $\int d\eta S\{\eta + \zeta\} = \int d\eta S\{\eta\} = \text{Pf } A$.

Durch die Entwicklung der Exponentialfunktion in (462) gewinnen wir Formeln für die Momente der η^i . Wenn wir auch noch die Matrix A durch $-A$ ersetzen, so lauten die ersten fünf Formeln dieser Art:

$$\begin{aligned} \int d\eta \exp(-\frac{1}{2}\eta^T A \eta) &= \text{Pf}(-A) \\ \int d\eta \eta^i \exp(-\frac{1}{2}\eta^T A \eta) &= 0 \\ \int d\eta \eta^i \eta^j \exp(-\frac{1}{2}\eta^T A \eta) &= \text{Pf}(-A) B^{ij} & B = A^{-1} \\ \int d\eta \eta^i \eta^j \eta^k \exp(-\frac{1}{2}\eta^T A \eta) &= 0 \\ \int d\eta \eta^i \eta^j \eta^k \eta^\ell \exp(-\frac{1}{2}\eta^T A \eta) &= \text{Pf}(-A)(B^{ij} B^{k\ell} - B^{ik} B^{j\ell} + B^{i\ell} B^{jk}) \end{aligned}$$

Die zweimalige Anwendung der FL-Transformation multipliziert die ‘‘Gauß-Funktion’’ (464) mit dem Faktor $\text{Pf } A \text{ Pf } A^{-1}$. Daraus schließen wir:

$$\text{Pf } A \text{ Pf } A^{-1} = (-1)^{\binom{n+1}{2}} = (-1)^m \quad (2m = n) \quad (466)$$

All unseren Anwendungen liegt die Blockstruktur zugrunde:

$$A = \begin{pmatrix} 0 & a \\ -a^T & 0 \end{pmatrix} \quad A^{-1} = \begin{pmatrix} 0 & -a^{-1T} \\ a^{-1} & 0 \end{pmatrix} \quad (467)$$

(a eine $m \times m$ -Matrix). In diesem Fall können wir von der Relation

$$\text{Pf } A = (-1)^{\binom{m}{2}} \det a$$

Gebrauch machen.

7.6 Funktionalintegrale der QED

Stellvertretend für die Eichtheorien mit Ankopplung an Materiefelder soll nun die $U(1)$ -Eichtheorie behandelt werden. Der Einfachheit halber ist in allen Formeln $\hbar = 1$ gesetzt. Wir gehen von einer Formulierung im Kontinuum aus, obwohl in diesem Fall der zugrunde liegende Vektorraum E der

Fermionen notwendig unendlich-dimensional ist und die Funktionalintegrale, Determinanten, Pfaffians etc. einer Regularisierung bedürfen, damit alle Ausdrücke dieses Abschnittes definiert und endlich sind.

Zuerst schreiben wir die Wirkung für ein Dirac-Teilchen der Masse m und der Ladung q so um, daß sie als Summe zweier quadratischer Formen erscheint:

$$\begin{aligned} W\{A, \Psi\} &= \int d^4x \left(\frac{1}{4} F^{k\ell} F_{k\ell} + \bar{\psi} (\not{\partial} + m + iq\not{A}) \psi \right) \\ &= \frac{1}{2} (\Psi, \mathcal{F}_A \Psi) + \frac{1}{2} (A, \mathcal{C}A) \end{aligned} \quad (468)$$

(siehe die Formeln (6.30-32) und (5.16-19)). Der Bispinor Ψ enthält die Komponenten von ψ und ψ^c . Das erzeugende Funktional der n -Punktfunktionen ist so definiert:

$$\begin{aligned} S\{\eta, j\} &= Z^{-1} \int \mathcal{D}A \mathcal{D}\Psi \exp\left(\Psi(\eta) + A(j) - W\{A, \Psi\}\right) \\ Z &= \int \mathcal{D}A \mathcal{D}\Psi \exp\left(-W\{A, \Psi\}\right) \end{aligned} \quad (469)$$

Hier läßt sich das Integral über die fermionischen Freiheitsgrade ausführen, weil die Wirkung bilinear in dem Ψ -Feld ist (diese Beobachtung trifft auf alle Eichtheorien zu):

$$S\{\eta, j\} = \int d\mu(A) \exp\left(A(j) - \frac{1}{2}(\eta, \mathcal{F}_A^{-1}\eta)\right) \quad (470)$$

$$d\mu(A) = Z^{-1} \mathcal{D}A \det(\not{\partial} + m + iq\not{A}) \exp\left(-\frac{1}{2}(A, \mathcal{C}A)\right) \quad (471)$$

$$Z = \int \mathcal{D}A \det(\not{\partial} + m + iq\not{A}) \exp\left(-\frac{1}{2}(A, \mathcal{C}A)\right) \quad (472)$$

Das Ergebnis kommt deshalb zustande, weil $\det(-C) = 1$ und

$$\text{Pf}(-\mathcal{F}_A) = \det\left(-C(\not{\partial} + m + iq\not{A})\right) = \det(\not{\partial} + m + iq\not{A}) \quad (473)$$

gilt. Auf diese Weise wurde eine wesentliche Vereinfachung erzielt. Die hierbei erzeugte **Fermion-Determinante** begegnete uns schon früher (Vorlesung QFT I, Kapitel 8). Dort haben wir auch Methoden angegeben, wie man diese Größe regularisieren kann. Dabei stellte sich u.a. heraus, daß unter der Ersetzung $q \rightarrow -q$ die Determinante in sich übergeht. Aus diesem Grunde ist das Maß $d\mu(A)$ symmetrisch, d.h. für alle Funktionen f gilt

$$\int d\mu(A) f(-A) = \int d\mu(A) f(A) \quad (474)$$

Es ist jetzt deutlich geworden, daß die Fermion-Determinante nicht nur bei Problemen mit äußeren Feldern auftritt, sondern daß sie eine zentrale Stellung in der Theorie einnimmt.

Durch Entwicklung des erzeugenden Funktionalen gelangen wir zu den Korrelationsfunktionen der $U(1)$ -Eichtheorie. Die erste Größe, auf die sich unser Interesse richtet, ist der euklidische Propagator des Fermions:

$$\langle \Psi_a(x) \Psi_b(y) \rangle = \int d\mu(A) \left(\mathcal{F}_A^{-1} \right)_{ab}(x, y) \quad (475)$$

Hieraus ergibt sich unmittelbar

$$\langle \psi(x) \bar{\psi}(y) \rangle = \int d\mu(A) (\not{\partial} + m + iq\not{A})^{-1}(x, y) \quad (476)$$

Eine weitere Vereinfachung scheint nicht mehr möglich zu sein. Der Propagator enthält als wesentliche Information die renormierte Masse des Dirac-Teilchens. Für $q \rightarrow 0$ geht der Ausdruck in den freien Propagator über. Die Formel (476) dient als Ausgangspunkt für Näherungen.

Der Propagator des Eichfeldes erhält die Gestalt

$$\langle A_k(x) A_\ell(y) \rangle = \int d\mu(A) A_k(x) A_\ell(y) \quad (477)$$

Er enthält Informationen über die Vakuum-Polarisation, d.h. über die virtuelle Paar-Produktion der Photonen. Schließlich ist die Vertex-Funktion

$$\langle \psi(x) A_k(y) \bar{\psi}(x') \rangle = \int d\mu(A) (\not{\partial} + m + iq\not{A})^{-1}(x, x') A_k(y) \quad (478)$$

von Interesse, in der die Information über die renormierte Ladung und das anomale magnetische Moment enthalten ist.

Anmerkung: Das Maß $d\mu(A)$ ist zwar normiert, aber es fehlt ein Beweis, daß es positiv ist. Man kann relativ leicht einsehen, daß es reell ist. Dazu weist man nach, daß die Fermion-Determinante reell ist. Alle n -Punktfunktionen des Photonfeldes sind dann ebenfalls reell, wie wir es aus physikalischen Gründen erwarten. In dem erzeugenden Funktional erscheint die Kopplungskonstante q an zwei Stellen: (1) in der Fermion-Determinante und (2) in dem Operator \mathcal{F}_A^{-1} . Ein Näherungsverfahren (eng. *quenched approximation*) gründet darauf, daß man $q = 0$ (äquivalent $m = \infty$) in der Determinante setzt. Dann verschwindet die Determinante überhaupt aus dem Maß $d\mu(A)$

und wir erhalten ein Gaußisches W -Maß $d\mu_0(A)$, das ohne jegliche Regularisierung auch im Kontinuum wohldefiniert ist:

$$\int d\mu_0(A) \exp iA(j) = \exp\{-\frac{1}{2}(j, \mathcal{C}^{-1}j)\} \quad (479)$$

Die Ersetzung von $d\mu(A)$ durch $d\mu_0(A)$ bewirkt, daß $A_k(x)$ ein freies Feld wird, daß das Fermion sozusagen an ein freies Feld koppelt. Die Unterdrückung der Fermion-Determinante bedeutet – in der Sprache der Störungstheorie – den Fortfall aller Feynman-Graphen, die wenigstens eine Fermionschleife enthalten. Die Näherung ist gut, solange die Masse des Dirac-Teilchens als “groß” angesehen werden darf. Denn rein formal betrachtet geht $d\mu(A)$ im Limes $m \rightarrow \infty$ in das Maß $d\mu_0(A)$ über.

7.7 Gittereichtheorien mit Materiefeldern

7.7.1 Das $SU(n)$ -Higgs-Modell

Für die reine Eichtheorie mit der Eichgruppe $SU(n)$ kann die Wirkung auf dem Gitter in der Form (5.70) definiert werden. Von dieser Wirkung unterscheidet sich

$$W(U) = -\frac{1}{2g^2} \sum_p \Re \text{Spur } U_{\partial p}$$

nur um eine Konstante. Für das $SU(n)$ -Higgs-Modell auf dem Gitter gibt man i.allg. die folgende Wirkung an:

$$W(U, \phi) = W(U) + \frac{1}{2} \sum_{xk} |\phi(x + e_k) - U_{xk} \phi(x)|^2 + \sum_x \lambda (|\phi(x)|^2 - \kappa)^2 \quad (480)$$

($\lambda > 0, \kappa > 0$); $\phi(x)$ ist ein n -komponentiges komplexes Skalarfeld, also ein Multiplett in der fundamentalen Darstellung der $SU(n)$. Die Wirkung zerfällt in natürlicher Weise in drei Terme: (1) eine Summe über alle Plaketten, (2) eine Summe über alle Gitterkanten und (3) eine Summe über alle Gitterpunkte. Nach Einführung einer Gitterkonstanten a geht $\phi(x + e_k) - U_{xk} \phi(x)$ auf \mathbb{Z}^4 in den Ausdruck

$$a\phi^a(x + ae_k) - \exp\left(aA_k^a(x)\right) a\phi^a(x) = a^2 \left(\partial_k - A_k^0(x)\right) \phi^0(x) + O(a^3)$$

über, der die kovariante Ableitung des Kontinuumsfeldes ϕ^0 enthält. Mit ϕ^a und A^a haben wir die Felder auf dem Gitter $(a\mathbb{Z})^4$ bezeichnet.

Es sei $d\nu(U)$ das auf 1 normierte Haarsche Maß auf der Gruppe $SU(n)$. Für die angegebene Wirkung und die Gitterperiode N lautet die Zustandssumme

$$Z = \int \mathcal{D}\phi \int \mathcal{D}U \exp\{-W(U, \phi)\} = e^{-F}$$

$$\mathcal{D}\phi = \prod_x \prod_{\alpha=1}^n d\Re\phi_\alpha(x) d\Im\phi_\alpha(x) \quad \mathcal{D}U = \prod_{xk} d\nu(U_{xk})$$

7.7.2 $SU(n)$ -Eichtheorie mit Fermionen

Wir betrachten ein Multipllett von n Dirac-Feldern in der Fundamentaldarstellung der $SU(n)$:

$$\psi(x) = \begin{pmatrix} \psi_1(x) \\ \vdots \\ \psi_n(x) \end{pmatrix} \quad \bar{\psi}(x) = (\bar{\psi}_1(x), \dots, \bar{\psi}_n(x)) \quad (481)$$

Die eichinvariante Wirkung hat auch hier wieder den typischen Aufbau:

$$W(\psi, \bar{\psi}, U) = W_2 + W_1 + W_0 \quad (482)$$

wobei W_2 (bzw. W_1, W_0) eine Summe über Plaketten (bzw. Gitterkanten, Gitterpunkte) darstellt:

$$W_2 = -\frac{1}{2g^2} \sum_p \Re \text{Spur } U_{\partial p} \quad (483)$$

$$W_1 = \frac{1}{2} \sum_{xk} \left(\bar{\psi}(x) \gamma_k U_{xk}^* \psi(x + e_k) - \bar{\psi}(x + e_k) \gamma_k U_{xk} \psi(x) \right) \quad (484)$$

$$W_0 = m \sum_x \bar{\psi}(x) \psi(x) \quad (485)$$

Die Vorschrift zur Konstruktion von W_1 entspricht der Einführung einer Gitterversion der kovarianten Ableitung in Form einer Matrix

$$D_{xy}^k = \begin{cases} \frac{1}{2} U_{xk}^* & y = x + e_k \\ -\frac{1}{2} U_{yk} & x = y + e_k \\ 0 & \text{sonst} \end{cases} \quad (486)$$

Für $U_{xk} = 1$ (alle xk) geht sie über in den Gittergradienten

$$\partial_{xy}^k = \begin{cases} \frac{1}{2} & y = x + e_k \\ -\frac{1}{2} & x = y + e_k \\ 0 & \text{sonst} \end{cases} \quad (487)$$

Dieser Gradient entspricht, wie man sieht, der halben Summe aus dem Vorwärts- und dem Rückwärts-Gradienten. Vereinfachend können wir nun schreiben:

$$W_1 = \sum_{xy} \bar{\psi}(x) \mathcal{D}_{xy} \psi(y) \quad \mathcal{D} \equiv \gamma_k D^k \quad (488)$$

Ein weitere Vereinfachung erzielen wir durch Einführung von

$$\Psi = \begin{pmatrix} \psi \\ \psi^c \end{pmatrix} \quad \mathcal{F}_U = \begin{pmatrix} 0 & -[C(\mathcal{D} + m)]^T \\ C(\mathcal{D} + m) & 0 \end{pmatrix} \quad (489)$$

weil dann die Wirkung in eine Bilinearform übergeht:

$$W_1 + W_0 = \frac{1}{2}(\Psi, \mathcal{F}_U \Psi) \quad (490)$$

Die fermionischen Freiheitsgrade lassen sich vollständig ausintegrieren, und wir erhalten:

$$\int \mathcal{D}\psi \int \mathcal{D}\bar{\psi} \exp\left(\Psi(\eta) - \frac{1}{2}(\Psi, \mathcal{F}_U \Psi)\right) = \det(\mathcal{D} + m) \exp\left(-\frac{1}{2}(\eta, \mathcal{F}_U^{-1} \eta)\right) \quad (491)$$

Die Fermion-Determinante hat auf einem Gitter eine etwas veränderte Struktur. Aber sie ist wohldefiniert und bedarf keiner Regularisierung. Bei N^4 Gitterpunkten besitzt die Matrix $\mathcal{D} + m$ die Dimension $4nN^4$. Selbst für bescheidene Gittergrößen (z.B. $N = 10$) ist eine numerische Auswertung dieser Determinante nur unter Einsatz eines Großrechners möglich.

Wir erhalten das folgende auf 1 normierte Maß auf der Eichgruppe:

$$d\mu(U) = Z^{-1} \mathcal{D}U \det(\mathcal{D} + m) \exp\left(\frac{1}{2g^2} \sum_p \Re \text{Spur } U_{\partial p}\right) \quad (492)$$

Mit seiner Hilfe lassen sich alle Erwartungswerte ausdrücken, z.B.

$$\langle U_{\partial G} \rangle = \int d\mu(U) U_{\partial G} \quad (493)$$

für eine Wilson-Schleife ∂G .

8 Funktionale Integration und Lokale Anomalien

8.1 Einführung

Symmetrien einer klassischen Feldtheorie, d.h. solche, die aus der Lagrange-Dichte folgen, führen unter Umständen zu unerwarteten Effekten, wenn man versucht, sie auf die quantisierte Fassung dieser Feldtheorie zu übertragen. Probleme dieser Art traten zuerst auf im Zusammenhang mit der Berechnung der Rate für den Zerfall $\pi^0 \rightarrow 2\gamma$ in einer chiralen invarianten Theorie, in der das Pion masselos war [1]. Die Verletzung einer globalen Symmetrie, wie sie hier vorlag, hatte nichts gemein mit dem Phänomen der spontanen Symmetriebrechung; denn das Pion blieb weiterhin masselos. Vielmehr handelte ich mich hier um topologisches Phänomen, für das Mathematiker wie M.F. Atiyah schnell Erklärungen hatten. Physiker sprechen von einer “globalen Anomalie” und in der oben zitierten Situation von der “Adler-Anomalie”.

Später entdeckte man auch “lokale Anomalien”. Sie treten auf in chiralen Eichtheorien von masselosen Fermionen. Die Existenz dieser Art von Anomalien führt zu einer Verletzung der Eichinvarianz derart, daß das Modell auf keine Weise mehr zu renormieren war (unter Beibehaltung der Lorentz-Invarianz). Als Folge dieser Erkenntnis schien es notwendig, jedem Modell eine Konsistenzbedingung aufzuerlegen, nämlich die Forderung, daß Anomalien gar nicht erst auftreten, oder, falls sie auftreten, das Modell als unvollständig zu erklären und nach Erweiterungen zu suchen mit dem Ziel, daß sich in dem erweiterten Modell die Anomalien gegenseitig aufheben. Ein Beispiel: Das Standardmodell ohne Quarks (sozusagen ein Modell für die Leptonen allein) besitzt eine lokale Anomalie und ist somit nicht konsistent formulierbar. Fügt man die Quarks hinzu, heben sich die Beiträge zu der Anomalie von Leptonen und Quarks auf. In gewisser Weise bedingen Leptonen und Quarks einander, müssen somit als Konstituenten *eines* Feldes aufgefaßt werden.

Es war zuerst Fujikawa [2], der den Ursprung des Problems in der Quantisierung durch Pfadintegrale suchte. Er fand, daß die Anwesenheit lokaler Anomalien nichts anderes ist als die Eigenschaft des fermionischen Maßes $d\psi d\bar{\psi}$ nicht invariant zu sein unter lokalen chiralen Eichtransformationen. Konkret: Es ist die Jacobi-Determinante, hervorgerufen durch die Transformation, die die Anomalie quantitativ beschreibt. Die Details der Lagrange-Dichte haben hierauf keinen Einfluß. Um aber eine Vorstellung davon zu geben, über welche Modelle wir reden, wollen wir annehmen, daß der fermionische Anteil der Lagrange-Dichte von der üblichen allgemeinen Form ist:

$$\mathcal{L}_F = \bar{\psi} i \not{\nabla} \psi .$$

Hier ist ∇ ein Dirac-Operator, der das Eichpotential enthält, während Massenterme abwesend sind. Das Dirac-Feld ψ kann u.U. viele Komponenten haben, da es zu einer Darstellung der Eichgruppe gehört. Der Ausdruck ∇ muß neu interpretiert werden und heißt “verallgemeinerter Dirac-Operator”, wenn wir die Yukawa-Wechselwirkung mit dem Higgs-Feld einbeziehen [3,4]. Dies wird notwendig, sobald wir uns dem Salam-Weinberg-Modell oder gar dem vollem Standardmodell zuwenden.

8.2 Vektorartige Modelle

Wir wollen von einer Formulierung im Minkowski-Raum ausgehen. Darin sei $\psi(x)$ ein mehrkomponentiges (zunächst klassisches) Dirac-Feld mit Komponenten in dem Vektorraum

$$W = S \otimes V,$$

wobei S der übliche Spinorraum ist, auf den die Gamma-Matrizen wirken, während V ein hermitescher Raum ist, ein komplex-linearer n -dimensionaler Raum mit einem Skalarprodukt. Nach Wahl einer (orthonomierten) Basis kann V mit \mathbb{C}^n identifiziert werden.

Es sei G eine kompakte Eichgruppe und $g \mapsto D(g)$ eine unitäre Darstellung von G auf V . Sobald V mit \mathbb{C}^n identifiziert ist, werden die Operatoren $D(g)$ zu unitären $n \times n$ -Matrizen. Wie übliche, bezeichne $\text{Lie } G$ die Lie-Algebra von G . Wir erreichen die Matrix, die das Element $a \in \text{Lie } G$ repräsentiert, durch eine Ableitung:

$$d(a) = \frac{d}{dt} D(e^{ta})_{t=0}.$$

Um jedoch die Formeln zu vereinfachen, werden wir in Zukunft α an anstelle von $d(a)$ schreiben. In bezug auf das Tensorprodukt $S \otimes \mathbb{C}^n$ schreiben wir sogar α anstelle von $\mathbb{1} \otimes \alpha$. In ähnlicher Weise schreiben wir γ^μ anstelle von $\gamma^\mu \otimes \mathbb{1}$.

Wir erinnern an die Konstruktion ‘adjungierter’ Spinoren und Operatoren im Sinne der Dirac-Theorie:

- Spinoren: $\bar{\psi} = \psi^* \gamma^0$ falls $\psi \in S \otimes \mathbb{C}^n$,
- Operatoren: $\bar{M} = \gamma^0 M^* \gamma^0$ falls $M \in \text{End}(S \otimes \mathbb{C}^n)$.

Es gilt $\gamma^0 = \gamma^{0*} = (\gamma^0)^{-1}$ und somit

$$\bar{\alpha} = \alpha^* = -\alpha, \quad \overline{\gamma_5 \alpha} = \gamma_5 \alpha. \quad (494)$$

Es gibt genau zwei Arten von lokalen Transformationen, die durch Symmetrien der Lagrange-Dichte hervorgerufen werden.

1. Nichtchirale Eichtransformationen. Sie enthalten nicht die γ_5 -Matrix:

$$\begin{aligned}\psi'(x) &= (U\psi)(x) = e^{\alpha(x)}\psi(x) \\ \overline{\psi'}(x) &= \overline{(U\psi)(x)} = \overline{\psi(x)}e^{-\alpha(x)}.\end{aligned}$$

2. Chirale Eichtransformationen. Sie enthalten die γ_5 -Matrix:

$$\begin{aligned}\psi'(x) &= (U\psi)(x) = e^{\gamma_5\alpha(x)}\psi(x) \\ \overline{\psi'}(x) &= \overline{(U\psi)(x)} = \overline{\psi(x)}e^{\gamma_5\alpha(x)}.\end{aligned}$$

In beiden Situationen benutzen wir die Beziehungen (494). Wir betrachten U als einen Integraloperator mit dem Kern

$$e^{\alpha(x)}\delta^4(x-y) \quad \text{resp.} \quad e^{\gamma_5\alpha(x)}\delta^4(x-y)$$

und schreiben $\overline{U\psi} = \bar{\psi}\bar{U}$. Für den Fall nichtchiraler Eichtransformationen gilt die Relation

$$\bar{U} = U^{-1}, \quad (495)$$

d.h. U ist pseudo-unitär. Für chirale Eichtransformationen hingegen gilt

$$\bar{U} = U, \quad (496)$$

d.h. U ist pseudo-hermitisch. Dieser Unterschied ist entscheidend für das Verhalten des Maßes $d\psi d\bar{\psi}$ unter einer Eichtransformation, wie wir sehen werden.

Für eine strenge Ableitung der Anomalie, ausgedrückt durch die Jacobi-Determinante, werden wir Pfadintegrale in euklidischer Raumzeit betrachten. Die formale Ersetzung $ix^0 \rightarrow x^4$ wird begleitet durch

$$\gamma^0 \rightarrow \gamma^4 \quad \gamma^k \rightarrow -i\gamma^k \quad (k = 1, 2, 3).$$

Entscheidend ist nun, daß die Felder ψ und $\bar{\psi}$ als vollkommen unabhängige Grassmann-Variablen zu verstehen sind. Gleichwohl ändert sich an den Eichtransformationen nichts, d.h. \bar{U} ist mit U entweder durch (495) oder (496) verknüpft. Voraussetzung für das Studium solcher Transformationen ist die Annahme, daß die euklidische Wirkung invariant ist. Die alles entscheidende Frage lautet: Ist auch das Maß $d\psi d\bar{\psi}$ invariant?

Es gehört zu den Besonderheiten von Grassmann-Variablen, daß unter Transformationen U das Maß mit der inversen (!) Determinante multipliziert erscheint:

$$d\psi' = (\text{Det } U)^{-1}d\psi, \quad d\bar{\psi}' = (\text{Det } \bar{U})^{-1}d\bar{\psi}$$

Folglich,

$$d\psi'd\bar{\psi}' = (\text{Det}(U\bar{U}))^{-1}d\psi d\bar{\psi} = \begin{cases} d\psi d\bar{\psi} & \text{if } U \text{ is non-chiral} \\ (\text{Det } U)^{-2}d\psi d\bar{\psi} & \text{if } U \text{ is chiral.} \end{cases}$$

Man erkennt: Nicht-chirale Symmetrien verursachen kein Problem; denn das Maß ist invariant. Deshalb betrachten wir von nun an nur noch den Fall chiraler Symmetrien. Sie geben Anlaß zu Anomalien wenn nicht $\text{Det } U = \pm 1$. Um die Anomalie in expliziter Form zu erhalten, müssen wir zuvor den Ausdruck $\text{Det } U$ geeignet interpretieren, wozu wir die Formel

$$\log(\text{Det } U)^{-2} = -2 \text{ Spur } \log U$$

heranziehen. Um der Spur einen Sinn zu geben, ist es notwendig, den euklidischen Raum E_4 durch eine geeignete kompakte (orientierte) 4-dimensionale Riemannsche Mannigfaltigkeit M zu ersetzen. Die Struktur der Spur beinhaltet in jedem Fall eine Integration über die Mannigfaltigkeit:

$$-2 \text{ Spur } \log U = \int_M \omega$$

Hier ist ω eine noch zu bestimmende \mathbb{C} -wertige 4-Form (eine Differentialform vom Grad vier und damit in jedem Punkt $x \in M$ proportional zur Volumenform der Mannigfaltigkeit M).

Es ist plausibel, daß ω von der "Krümmung" F des Eichzusammenhanges abhängt, einer 2-Form, die in lokalen Koordinaten als

$$F = \frac{1}{2}F_{\mu\nu}(x) dx^\mu \wedge dx^\nu$$

geschrieben werden kann. In bekannter Weise, läßt sich hieraus eine 4-Form konstruieren:

$$F \wedge F = \frac{1}{4}F_{\mu\nu}(x)F_{\sigma\tau}(x) dx^\mu \wedge dx^\nu \wedge dx^\sigma \wedge dx^\tau.$$

Man beachte auch

$$dx^\mu \wedge dx^\nu \wedge dx^\sigma \wedge dx^\tau = \epsilon^{\mu\nu\sigma\tau} d^4x. \quad (497)$$

Weiterhin ist plausibel, daß ω proportional zu $F \wedge F$ ist, gestützt durch die Beobachtung, daß dieser Ausdruck unter einer Paritätsoperation (Raumspiegelung) so wie γ_5 sein Vorzeichen wechselt. Auch muß ω proportional zu der 0-Form $\alpha(x)$ sein, welche die chirale Eichtransformation beschreibt. Schließlich sollte ω eichinvariant konstruiert sein, d.h. unverändert bleiben unter einer simultanen Ersetzung der Art

$$\alpha \mapsto e^\beta \alpha e^{-\beta}, \quad F \mapsto e^\beta F e^{-\beta}$$

wobei $\beta(x)$ irgendeine Eichfunktion darstellt so wie $\alpha(x)$. Es gibt nur einen Ausdruck, der alle diese Bedingungen erfüllt:

$$\omega \sim \text{tr}_V (\alpha F \wedge F).$$

Eine Technik, den Vorfaktor zu bestimmen, ist unter den Namen *heat kernel expansion* bekannt:

1. Man ersetzt zunächst den Integralkern $\langle x|y \rangle = \delta^4(x-y)$ durch den *heat kernel*

$$\langle x | \exp(t \nabla^2) | y \rangle \quad (t > 0)$$

wobei ∇ den Dirac-Operator bezeichnet. Somit ist ∇^2 ein verallgemeinerter Laplace-Operator mit Spektrum in $(-\infty, 0]$.

2. Sodann berechnet man die sog. Superspür bezüglich der \mathbb{Z}_2 -Graduierung von W , gegeben durch die Eigenwerte von γ_5 :

$$\text{str}_W \left(\alpha(x) \langle x | \exp(t \nabla^2) | x \rangle \right) \equiv \text{tr}_W \left(\gamma_5 \alpha(x) \langle x | \exp(t \nabla^2) | x \rangle \right)$$

3. Am Ende führt man den Limes $t \rightarrow 0$ aus.

Das Resultat (hier ohne Rechnung) ist:

$$\omega = (2\pi)^{-2} \text{tr}_V (\alpha F \wedge F). \quad (498)$$

Mit Blick auf (497):

$$\omega = (4\pi)^{-2} \epsilon^{\mu\nu\sigma\tau} \text{tr}_V \left(\alpha(x) F_{\mu\nu}(x) F_{\sigma\tau}(x) \right) d^4x. \quad (499)$$

Der Ausdruck auf der rechten Seite deutet auf einen Zusammenhang mit der Chern-Pontryagin-Form (charakteristisch für die Mannigfaltigkeit M und den Eichzusammenhang):

$$\text{ch}(D) = (2\pi)^{-2} \text{tr}_V (F \wedge F).$$

Das Index-Theorem von Atiyah-Singer³⁵ sagt aus, daß

$$\text{ind}(\nabla) = \frac{1}{2} \int_M \text{ch}(D)$$

³⁵Der Zusammenhang zwischen Anomalien und dem Index-Theorem wurde von vielen Autoren bemerkt. Siehe hierzu [5].

wobei $\text{ind}(\nabla)$ den Index des Dirac-Operators bezeichnet,

$$\text{ind}(\nabla) = \dim \ker(\nabla^+) - \dim \ker(\nabla^-),$$

bezüglich der Blockdarstellung

$$\nabla = \begin{pmatrix} 0 & \nabla^- \\ \nabla^+ & 0 \end{pmatrix}.$$

induziert durch die Eigenwerte ± 1 von γ_5 .

Als eine physikalische Konsistenzbedingung ist zu fordern, daß die rechte Seite von (499) verschwindet. Hieraus folgt eine Bedingung an die Darstellung von Lie G auf V . Sei iT_a eine Basis für diese Darstellung der Lie-Algebra mit $T_a^* = T_a$. Wir nennen dann T_a die *Generatoren*. Weil G kompakt ist, läßt sich erreichen, daß

$$\text{tr}_V(T_a T_b) = N \delta_{ab} \quad (N \geq 0).$$

erreichen. Der Spur dritter Ordnung, $\text{tr}_V(T_a T_b T_c)$, gilt unsere besondere Aufmerksamkeit. Sie kann in einen total symmetrischen und eine total antisymmetrischen Anteil – bezüglich der Permutationen aller Indizes – zerlegt werden:

$$\begin{aligned} 2 \text{tr}_V(T_a T_b T_c) &= d_{abc} + iN f_{abc} \\ \text{tr}_V(T_a \{T_b, T_c\}) &= d_{abc} \\ \text{tr}_V(T_a [T_b, T_c]) &= iN f_{abc}. \end{aligned}$$

Man beachte, daß f_{abc} mit den Strukturkonstanten der Lie-Algebra übereinstimmen. Am Ende zeigt die Entwicklung

$$F_{\mu\nu}(x) = F_{\mu\nu}^a(x) iT_a, \quad \alpha(x) = \alpha^a(x) iT_a$$

zusammen mit (499), daß die Konsistenzbedingung $\omega = 0$ auf eine algebraische Bedingung führt:

$$\text{tr}_V(T_a \{T_b, T_c\}) = 0. \quad (500)$$

Diese Bedingung gilt in einer Situation, bei der sich links- und rechtshändige masselosen Fermi-Felder unter der gleichen (!) Darstellung der nicht-chiralen Eichgruppe transformieren. Modelle dieser Art heißen “vektorartig” wegen der besonderen Struktur der Lagrange-Dichte. Die QED und die QCD mit masselosen Fermionen besitzen diese Struktur.

8.3 Chirale Modelle

Wir wollen nun eine allgemeinere Situation ins Auge fassen, bei der links- und rechtshändige Fermionfelder sich unterschiedlich unter der Eichgruppe transformieren. Solche Modelle wollen wir kurz *chiral* nennen. Wir haben es dann mit einer Darstellung $D = D^+ \oplus D^-$ auf einem \mathbb{Z}_2 -graduerten Vektorraum

$$V = V^+ \oplus V^- .$$

zu tun. Hieraus folgt eine Graduierung des Tensorproduktes $W = S \otimes V$ mit dem Spinorraum:

$$\begin{aligned} W &= W^+ \otimes W^- \\ W^+ &= S^+ \otimes V^+ \oplus S^- \otimes V^- \\ W^- &= S^- \otimes V^+ \oplus S^+ \otimes V^- . \end{aligned}$$

Wir nehmen an, daß das Dirac-Feld ψ gerade Parität hat. Der Dirac Operator ist in jedem Fall ungerade:

$$\psi(x) \in W^+ , \quad \not{\nabla} \psi(x) \in W^- .$$

Das Feld kann in links- und rechtshändige Komponenten zerlegt werden:

$$\psi_R(x) \in S^+ \otimes V^+ , \quad \psi_L(x) \in S^- \otimes V^- .$$

Dies zeigt: ψ_R transformiert sich gemäß der Darstellung D^+ , ψ_L gemäß der Darstellung D^- .

Es existieren Generatoren $T_a = T_a^+ \oplus T_a^-$ für die Darstellung $D = D^+ \oplus D^-$ und Elemente der Lie-Algebra dargestellt durch

$$\alpha_+ = \alpha_+^a T_a^+ , \quad \alpha_- = \alpha_-^a T_a^- , \quad \alpha_\pm^a \in \mathbb{R} . \quad (501)$$

Indem wir die frühere Rechnung der Anomalie wiederholen und an die neue Situation anpassen, kommen wir zu dem Schluß, daß die Formel (498) für die Anomalie weiterhin gültig ist, falls wir darin die folgende Interpretation, d.h. Ersetzung vornehmen:

$$2\alpha = (+\alpha_+) \oplus (-\alpha_-) .$$

Die Faktoren ± 1 vor α_\pm sind gerade die Eigenwerte γ_5 . Die Konsistenzbedingung $\text{tr}(\alpha\{T_a, T_b\}) = 0$ nimmt, wenn wir gemäß (501) entwickeln, nun die folgende Form an:

$$\text{str}(T_a\{T_b, T_c\}) \equiv \text{tr}_+(T_a^+\{T_b^+, T_c^+\}) - \text{tr}_-(T_a^-\{T_b^-, T_c^-\}) = 0 . \quad (502)$$

Hier bezeichnen str and tr_\pm die sog. *Superspur* in V und die gewöhnliche Spur in V^\pm . Mit anderen Worten, die Anomalie, hervorgerufen durch die Darstellung D^- auf linkshändigen Spinoren muß durch die Anomalie aufgehoben werden, die von der Darstellung D^+ auf den rechtshändigen Spinoren hervorgerufen wird [6].

8.4 Anomalie-freie Eichtheorien

8.4.1 Das Wunder

Eine Lie-Gruppe wird *sicher* genannt, falls die Anomalie-Koeffizienten in allen (unitären) Darstellungen dieser Gruppe verschwinden. Sichere klassische Gruppen sind:

$$SU(2), SO(n) (n \neq 6), Sp(2n).$$

Sichere Ausnahmegruppen sind:

$$G_2, F_4, E_6, E_7, E_8.$$

Ferner, reelle Darstellungen von nichtsicheren Gruppen sind frei von Anomalien. Zum Beispiel: Die Gruppe $SU(3)$, obwohl nichtsicher, besitzt die reelle anomaliefreie Darstellung $3 \oplus \bar{3}$.

Keine dieser Kriterien deckt jedoch Situationen ab, wie sie etwa im Standardmodell vorliegen. Die gegenseitige Aufhebung von Beiträgen zur Anomalie, geliefert durch Leptonen einerseits und Quarks andererseits, erscheint wie ein Wunder. Ein besseres Verständnis gelingt auf folgende Weise:

Theorem. Das ‘Wunder’ geschieht in solchen reduziblen Darstellungen der Eichgruppe G , die zwei Eigenschaften besitzen:

1. Die Eichgruppe G ist entweder $U(n)$ ($n \geq 4$) oder eine Untergruppe davon. Die definierende Darstellung wirkt auf dem Raum \mathbb{C}^n .
2. Die linkshändigen Fermionfelder transformieren sich gemäß der Darstellung Λ^- von G während die rechthändigen Felder sich gemäß der Darstellung Λ^+ transformieren. Zur Erinnerung: Die Darstellungen Λ^\pm wirken auf den geraden bzw. ungeraden Teilraum der äußeren Algebra $\Lambda \mathbb{C}^n$.

Die Fälle $n = 2, 3$ erfordern eine gesonderte Behandlung:

Die Gruppe $SU(2)$ ist sicher, d.h. ohne weitere Bedingungen an ihre Darstellung. Die Gruppe $SU(3)$ bildet eine Ausnahme in dem Sinne, daß die Anomaliefreiheit, wie sie für $SU(n)$ ($n \geq 4$) auf der äußeren Algebra vorliegt, hier nicht gegeben ist.

Das Standardmodell wird abgedeckt durch das Theorem, wenn wir annehmen:

1. $G \subset SU(5)$.
2. $\text{Lie } G = \mathfrak{su}(3) \oplus \mathfrak{su}(2) \oplus \mathfrak{u}(1)$.

Genau betrachtet benötigen wir nur die erste Bedingung, um die gewünschte Anomaliefreiheit zu gewährleisten.

8.4.2 Die äußere Algebra und ihre \mathbb{Z}_2 -Graduierung

Die *defierende Darstellung* der Gruppe $U(n)$ ist gegeben durch unitäre Matrizen $u \in U(n)$, interpretiert als lineare Operatoren auf dem Raum \mathbb{C}^n . Sie induziert eine reduzible Darstellung Λ der Dimension 2^n auf der äußeren Algebra $\bigwedge \mathbb{C}^n$:

$$\begin{array}{ccc} \mathbb{C}^n & \xleftrightarrow{u} & \mathbb{C}^n \\ \downarrow & & \downarrow \\ \bigwedge \mathbb{C}^n & \xleftrightarrow{\Lambda u} & \bigwedge \mathbb{C}^n . \end{array}$$

Sie zerfällt in irreduzible Bestandteile \bigwedge^p in den Unterräumen $\bigwedge^p \mathbb{C}^n$ (das p -te äußere Produkt von \mathbb{C}^n) der Dimension $\binom{n}{p}$:

$$\Lambda = \bigwedge^0 \oplus \bigwedge^1 \oplus \dots \oplus \bigwedge^n . \quad (503)$$

Eine andere Schreibweise, gültig für alle $u \in U(n)$, ist:

$$\bigwedge^p u = u \wedge u \wedge \dots \wedge u \quad (p \text{ factors}).$$

Unsere fundamentale Annahme lautet:

Für geeignet gewähltes n entsprechen alle fundamentalen Fermionen den Darstellungen der Liste (503). Das Standardmodell benutzt $n = 5$.

In dem wir n variieren, können wir alle irreduziblen Darstellungen in einer Tabelle der folgenden Art unterbringen:

n	irreps of $SU(n)$									
2			\bigwedge^0		\bigwedge^1		\bigwedge^2			
3		\bigwedge^0		\bigwedge^1		\bigwedge^2		\bigwedge^3		
4		\bigwedge^0	\bigwedge^1		\bigwedge^2	\bigwedge^3		\bigwedge^4		
5	\bigwedge^0		\bigwedge^1	\bigwedge^2		\bigwedge^3	\bigwedge^4		\bigwedge^5	

Anschaulicher ist ein Pascal-ähnliches Dreieck, indem wir die Dimensionen wiedergeben:

n	irreps of $SU(n)$									
2			1		2		1			
3			1		3		$\bar{3}$		1	
4		1		4		6		$\bar{4}$		1
5	1		5		10		$\bar{10}$		$\bar{5}$	

Was die Gruppe $SU(n)$ angeht, so gibt es keinen Unterschied zwischen den Darstellungen \bigwedge^0 und \bigwedge^n : Sie sind beide eindimensional und trivial. Für $u \in U(n)$ jedoch gibt es einen Unterschied: $\bigwedge^0 u = 1$, $\bigwedge^n u = \det u$.

Wir nutzen die Eigenschaft der äußeren Algebra \mathbb{Z}_2 -graduirt zu sein. Dies bedeutet, daß wir eine Zerlegung

$$\Lambda \mathbb{C}^n = \Lambda^+ \mathbb{C}^n \oplus \Lambda^- \mathbb{C}^n$$

haben, wobei

$$\Lambda^+ \mathbb{C}^n = \sum_{p=\text{even}} \Lambda^p \mathbb{C}^n, \quad \Lambda^- \mathbb{C}^n = \sum_{p=\text{odd}} \Lambda^p \mathbb{C}^n, \quad \dim \Lambda^\pm \mathbb{C}^n = 2^{n-1}.$$

Die Darstellung Λ of $U(n)$ respektiert die \mathbb{Z}_2 -Graduierung und zerfällt somit in die direkte Summe $\Lambda^+ \oplus \Lambda^-$, wobei

$$\Lambda u = \begin{pmatrix} \Lambda^+ u & 0 \\ 0 & \Lambda^- u \end{pmatrix}, \quad u \in U(n).$$

Die Darstellung der Lie-Algebra $\mathfrak{u}(n)$ on $\Lambda \mathbb{C}^n$ ist durch die Vorschrift

$$\theta(a) = \frac{d}{dt} \Lambda \exp(ta)|_{t=0} = \begin{pmatrix} \theta^+(a) & 0 \\ 0 & \theta^-(a) \end{pmatrix}$$

festgelegt. Der Operator $\theta(a)$ ändert nicht die Parität und wird deshalb *gerade* genannt. Hierfür schreiben wir:

$$\theta(a) \in \text{End}^+ \Lambda \mathbb{C}^n.$$

Superalgebren wie $\text{End} \Lambda \mathbb{C}^n$ haben zwei Arten von Spuren:

- Die gewöhnliche Spur, mit tr bezeichnet, verschwindet auf Kommutatoren.
- Die Superspur, mit str bezeichnet, verschwindet auf Superkommutatoren³⁶.

Insbesondere gelten die Formeln

$$\begin{aligned} \text{tr} \Lambda u &= \text{tr} \Lambda^+ u + \text{tr} \Lambda^- u = \det(1 + u) \\ \text{str} \Lambda u &= \text{tr} \Lambda^+ u - \text{tr} \Lambda^- u = \det(1 - u) \end{aligned}$$

die man als Sonderfälle ($z = \pm 1$) einer sehr viel allgemeineren Spur auffassen kann:

$$\text{tr}_z \Lambda u = \sum_{p=0}^n z^p \text{tr} \Lambda^p u = \det(1 + zu) \quad (z \in \mathbb{C}).$$

³⁶Der Superkommutator von zwei Elementen a und b einer graduirten Algebra $A = A^+ \oplus A^-$ ist deren Antikommutator, wenn beide Elemente in A^- liegen, anderenfalls der Kommutator.

Mit Blick auf (502) haben wir nunmehr die Aufgabe, für $a, b, c \in \mathbf{u}(n)$ die Superspur

$$\text{str}(\theta(a)\{\theta(b), \theta(c)\})$$

zu berechnen, in der wir die Anomalie erkennen. Dann bleibt zu entscheiden, ob diese Superspur verschwindet.

8.4.3 Techniken zur Berechnung

Wie zuvor wird die Gruppeneinheit mit $\mathbb{1}$ bezeichnet. Hingegen soll mit $\bigwedge \mathbb{1} = \mathbb{1}$ der Einheitsoperator in $\text{End} \bigwedge \mathbb{C}^n$ gemeint sein. Die Formel $\text{tr}_z \bigwedge u = \det(1 + zu)$ kann auf andere Weise geschrieben werden, nämlich als

$$\log \text{tr}_z \bigwedge u = \text{tr} \log(1 + zu) \quad u \in U(n), \quad 1 + zu \neq 0. \quad (504)$$

Die erste und einfachste Rechnung – wir setzen $u = 1$ – führt auf die Spur nullter Ordnung:

$$\text{tr}_z \mathbb{1} = (1 + z)^n.$$

Die nächsten Probleme betreffen die Berechnung von Spuren erster, zweiter und dritter Ordnung. Im ersten Schritt ersetzen wir u durch $e^{ta}u$ in (504), berechnen die Ableitung bei $t = 0$ und erhalten

$$\text{tr}_z(\theta(a)\bigwedge u) = z \text{tr}_z \bigwedge u \text{tr}(a u(1 + zu)^{-1}). \quad (505)$$

Wir gehen zur Einheit $u = 1$ um die Spur erster Ordnung zu erhalten:

$$\text{tr}_z \theta(a) = z(1 + z)^{n-1} \text{tr} a.$$

In einem zweiten Schritt ersetzen wir u durch $e^{tb}u$ in (505) und berechnen die Ableitung an der Stelle $t = 0$:

$$\begin{aligned} \text{tr}_z(\theta(a)\theta(b)\bigwedge u) &= z \text{tr}_z(\theta(b)\bigwedge u) \text{tr}(a u(1 + zu)^{-1}) \\ &+ z \text{tr}_z(\bigwedge u) \sum_{m=0}^{\infty} (-z)^m \sum_{k=0}^m \text{tr} \left(a(\text{Ad } u)^k b u^{m+1} \right) \end{aligned} \quad (506)$$

wobei wir von $(\text{Ad } u)b = ubu^{-1}$, der adjungierten Darstellung Gebrauch machen. Wir gehen zur Einheit $u = 1$ um die Spur zweiter Ordnung zu erhalten:

$$\text{tr}_z(\theta(a)\theta(b)) = z(1 + z)^{n-2} (z \text{tr} a \text{tr} b + \text{tr}(ab)).$$

In einem weiteren dritten Schritt ersetzen wir u durch e^{tc} in (506) und nehmen eine Umformung vor,

$$z \sum_{m=0}^{\infty} (-z)^m \sum_{k=0}^m \text{tr} \left(a(\text{Ad } u)^k b u^{m+1} \right) = \sum_{n=0}^{\infty} t^n \text{tr} \left(a(\text{ad } c)^n b f_n(z e^{tc}) \right),$$

bei der die Hausdorff-Formel

$$(\text{Ad } e^{tc})^k b = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{k^n}{n!} t^n (\text{ad } c)^n b, \quad (\text{ad } c)b = [c, b]$$

benutzt und gewisse komplexen Funktionen eingeführt wurden:

$$f_n(z) = z \sum_{m=0}^{\infty} (-z)^m \sum_{k=0}^m \frac{k^n}{n!}$$

Offenbar lassen sie sich als analytische Funktionen auf $\mathbb{C} \setminus \{-1\}$ verstehen. Sobald wir $u = e^{tc}$ gesetzt haben, berechnen wir die Ableitung auf beiden Seiten von (506) bei $t = 0$ und erhalten so eine vorläufige Formel für Spur dritter Ordnung:

$$\begin{aligned} \text{tr}_z(\theta(a)\theta(b)\theta(c)) &= z(1+z)^{-1} \text{tr}_z(\theta(b)\theta(c)) \text{tr } a \\ &\quad + z(1+z)^{-2} \text{tr}_z \theta(b) \text{tr}(ac) \\ &\quad + f_0(z) \text{tr}_z \theta(c) \text{tr}(ab) \\ &\quad + z f'_0(z) \text{tr}_z \mathbb{1} \text{tr}(abc) \\ &\quad + f_1(z) \text{tr}_z \mathbb{1} \text{tr}(a[c, b]). \end{aligned}$$

Man kann nun leicht zeigen, daß die folgenden Darstellungen gelten:

$$f_0(z) = z(1+z)^{-2} \quad f_1(z) = -z^2(1+z)^{-3}$$

Daraus folgt unmittelbar:

$$\begin{aligned} z f'_0(z) \text{tr}_z \mathbb{1} &= z(1+z)^{n-3} (1-z) \\ f_1(z) \text{tr}_z \mathbb{1} &= -z^2(1+z)^{n-3}. \end{aligned}$$

Fügen wir nun alle gewonnenen Informationen zusammen, so gewinnen wir das Endresultat

$$\text{tr}_z(\theta(a)\theta(b)\theta(c)) = (1+z)^{n-3} (z\alpha_1 + z^2\alpha_2 + z^3\alpha_3) \quad (507)$$

mit den Abkürzungen

$$\begin{aligned} \alpha_1 &= \text{tr}(abc) \\ \alpha_2 &= \text{tr } a \text{tr}(bc) + \text{tr } b \text{tr}(ac) + \text{tr } c \text{tr}(ab) - \text{tr}(acb) \\ \alpha_3 &= \text{tr } a \text{tr } b \text{tr } c. \end{aligned}$$

Im Fall $n \geq 3$ ist die Spur dritter Ordnung zweifellos ein Polynom n -ter Ordnung in z , wie zu erwarten war. Für $n = 2$ hingegen deutet die Formel (507)

eine scheinbare Singularität an der Stelle $z = -1$ an, obwohl das Ergebnis ein Polynom zweiter Ordnung sein sollte. Die Lösung dieser Diskrepanz besteht darin, daß speziell für 2×2 Matrizen (hier a, b, c) eine Identität existiert:

$$\text{tr}(a\{b, c\}) = \text{tr } a \text{tr}(bc) + \text{tr } b \text{tr}(ac) + \text{tr } c \text{tr}(ab) - \text{tr } a \text{tr } b \text{tr } c$$

Deshalb gilt

$$z\alpha_1 + z^2\alpha_2 + z^3\alpha_3 = (1+z)(z \text{tr}(abc) + z^2 \text{tr } a \text{tr } b \text{tr } c)$$

und somit für $n = 2$

$$\text{tr}_z(\theta(a)\theta(b)\theta(c)) = z \text{tr}(abc) + z^2 \text{tr } a \text{tr } b \text{tr } c$$

Dies ist ein sehr einfacherer Ausdruck. Er kann natürlich auch auf direktem Wege erhalten werden, indem man von Anfang an $n = 2$ voraussetzt.

8.4.4 Diskussion des Resultates

Um zu den für uns wichtigen Aussagen zu kommen, setzen wir $z = -1$ in den obigen Formeln und benutzen die Abkürzung

$$s = \text{tr } a \text{tr}(bc) + \text{tr } b \text{tr}(ac) + \text{tr } c \text{tr}(ab) - \text{tr } a \text{tr } b \text{tr } c .$$

Für den symmetrische Anteil der Superspur erhalten wir den Ausdruck

$$\frac{1}{2}\text{str}(\theta(a)\{\theta(b), \theta(c)\}) = \begin{cases} \text{tr } a \text{tr } b \text{tr } c - s/2 & \text{if } n = 2 \\ s - \text{tr}(a\{b, c\}) & \text{if } n = 3 \\ 0 & \text{if } n \geq 4 \end{cases}$$

In Worten:

- Die Anomalie verschwindet falls $n \geq 4$.
- Die Anomalie verschwindet falls $n = 2$ und a, b, c spurfrei sind.
- Die Anomalie verschwindet *nicht*(!) falls $n = 3$, selbst dann nicht, wenn a, b, c spurfrei sind.

Die Eichgruppe $SU(5)$, Kandidat für einige *grand unified theories* (GUTs), ist bekanntlich *nichtsicher*. Wenn sich jedoch auf der äußeren Algebra $\bigwedge \mathbb{C}^5$ operiert, ist diese Darstellung frei von Anomalien. Gleiches gilt für jede Untergruppe $G \subset SU(5)$, auch auch für die Eichgruppe

$$G = \{(u, v) \in U(3) \times U(2) \mid \det u \cdot \det v = 1\}$$

des Standardmodells mit der Lie-Algebra

$$\text{Lie } G \cong \mathfrak{su}(3) \oplus \mathfrak{su}(2) \oplus \mathfrak{u}(1).$$

Alle bekannten fundamentalen Fermionen (Leptonen und Quarks) lassen sich in drei Generationen unterbringen. In jeder Generation finden wir 16 Weyl-Felder (rechts- und linkhändige Dirac-Felder) der Teilchen und 16 Weyl-Felder der zugehörigen Antiteilchen. Dies ergibt die korrekte Dimension:

$$16 + 16 = 2^5 = \dim \wedge^5 \mathbb{C}.$$

Der Unterraum $\wedge^0 \mathbb{C}^5 \cong \mathbb{C}$ ist dem rechtshändigen Neutrino vorbehalten ν_{eR} (bzw. $\nu_{\mu R}$ und $\nu_{\tau R}$). Da G auf $\wedge^0 \mathbb{C}^5$ trivial wirkt, koppelt das rechthändige Neutrino nicht an die Eichfelder, besitzt also weder schwache noch elektromagnetische noch starke Wechselwirkung. Jedoch die Kopplung an das Higgs-Feld gibt den Neutrinos Masse und den Leptonen eine CKM-Matrix. Siehe hierzu das entsprechende Kapitel über das Standardmodell.

Literatur

1. S.L. Adler: Phys.Rev. **177** (1969) 2426
J.S. Bell and R. Jackiw: Nouvo Cim. A **60** (1969) 47
W.A. Bardeen: Phys.Rev. **184** (1969) 1848
S.L. Adler: *Lectures on Elementary Particles and Quantum Field Theory*, Ed. Deser, MIT, Cambridge, MA 1970
S. Coleman and B. Grossman: Nucl.Phys. B **203** (1982) 205
L. Baulieu: Nucl.Phys. B **241** (1984) 557
R. Stora: *Progress in Gauge Field Theory*, (Cargese 1983) Plenum New York 1984
2. K. Fujikawa: Phys.Rev. D **21** (1980) 2848, Erratum: D **22** (1980) 1499
K. Fujikawa: Phys.Rev. D **25** (1982) 2584
3. G. Roepstorff: hep-th/9907221 and 0005079
G. Roepstorff and Ch. Vehns: math-ph/9908029 and hep-th/0006065
4. N. Berline, E. Getzler, and M. Vergne, *Heat Kernels and Dirac Operators*, Springer Berlin Heidelberg 1992
G. Roepstorff and Ch. Vehns: math-ph/9908029
5. L. Alvarez-Gaumé and P. Ginsparg: Ann.Phys. **161** (1985) 423
L. Alvarez-Gaumé and P. Ginsparg: Nucl.Phys. B **243** (1984) 449

J. Wess and B. Zumino: Phys.Lett. **37B** (1971) 95

H. Grosse and E. Langmann: hep-th/0004176

J. Fröhlich and B. Pedrini: hep-th/0002195

6. R. Ticciati, *Quantum Field Theory For Mathematicians*, Encyclopedia of Mathematics and its Applications **72**, Cambridge University Press 1999