Osa IV

Kaksiulotteisen Ising-mallin ratkaisusta

1. Wickin kaava

Käymme tässä luvussa läpi kolme Wickin kaavana tunnettua tulosta. Aloitamme probabilistisesta Wickin kaavasta, jonka avulla voidaan laskea gaussisten satunnaismuuttujien polynomiset odotusarvot eli momentit. Tarkastelemme sen jälkeen kahta algebrallista Wickin kaavaa, bosonista ja fermionista. Bosoninen ja fermioninen Wickin kaava ovat tyypillisiä kvanttikenttäteorian tekniikoita, algebrallisesti ne perustuvat vastaavasti niinkutsuttuihin kanonisiin kommutaatiorelaatioihin ja kanonisiin antikommutaatiorelaatioihin.

Bosoninen Wickin kaava on tavallaan algebrallinen uudelleenmuotoilu probabilistiselle Wickin kaavalle: erityisesti gaussisten satunnaismuuttujien momenttien laskeminen voidaan helposti palauttaa myös siihen.

Fermioninen Wickin kaava taas tulisi käyttöön kaksiulotteista Ising-mallia pidemmälle analysoitaessa: mallin ratkaisussa keskeinen siirtomatriisi voidaan ajatella lineaarioperaattorina samalla fermionisella Fockin avaruudella, kuin millä Wickin kaavaan tarvittavat kanoniset antikommutaatiorelaatiot toteuttavat operaattoritkin määritellään.

Kaikissa Wickin kaavoissa esiintyy samoja kombinatorisia olioita, pariosituksia.

Määritelmä IV.1. Äärellisen joukon S *pariositus* (toisinaan käytetään termejä paripartitio tai paritus) on järjestämätön kokoelma P kaksialkioisia joukon S osajoukkoja, jotka ovat keskenään erillisiä, ja joiden lukumäärä on $\frac{\#S}{2}$.

Huomautus IV.2. Lukumäärä $\#P = \frac{\#S}{2}$ on täsmälleen sellainen, että pariositus P todella muodostaa joukon S osituksen: jokainen joukon S alkio kuuluu täsmälleen yhteen pariin $\{j, k\} \in P$.

Esimerkki IV.3. Kuusialkioisen joukon $\{a, b, c, d, e, f\}$ pariosituksia ovat muun muassa $P = \{\{a, b\}, \{c, d\}, \{e, f\}\}$ ja $P = \{\{a, c\}, \{b, f\}, \{d, e\}\}$.

Esimerkki IV.4. Jos joukon S alkioiden lukumäärä $\#S$ on pariton, ei joukolla S ole yhtään pariositusta.

Jos $\#S = 2m$, missä $m \in \mathbb{N}$, on joukon S pariositusten lukumäärä on pariton kertoma $(2m-1)!! = (2m-1)(2m-3) \cdots 5{\cdot}3{\cdot}1$ — järjestämällä alkiot paripartitio voidaan konstruoida valitsemalla ensimmäiselle alkiolle mikä tahansa pari $(2m-1)$ mahdollisesta muusta alkiosta, ja jatkamalla parien valintaa sitten rekursiivisesti vielä parittamattomien alkioiden kesken.

On luontevaa määritellä, että tyhjällä joukolla $S = \emptyset$ on yksi pariositus, nimittäin $P = \emptyset$ — siis tyhjän joukon pariositusten joukko ei ole tyhjä.

Esimerkki IV.5. Usein toistuva temppu on liittää permutaatioon $\pi \in S_{2m}$ paripartitio

$$P = \{\{\pi(1), \pi(2)\}, \{\pi(3), \pi(4)\}, \ldots, \{\pi(2m-1), \pi(2m)\}\}.$$

Näin saatu kuvaus joukolta S_{2m} joukon $[\![1, 2m]\!]$ paripartitioiden joukolle on selvästi surjektiivinen, mutta ei toki injektiivinen. Samalle paripartitiolle kuvautuvat esimerkiksi sellaiset permutaatiot, jotka saadaan toisistaan vaihtamalla järjestys minkä tahansa parin sisällä tai vaihtamalla kokonaisten parien paikat. Koska pareja on m kappaletta, parien sisäiset järjestykset voidaan valita 2^m tavalla, ja parien keskinäinen järjestys $m!$ tavalla. Nähdään, että sellaisia permutaatioita, jotka kuvautuvat samalle paripartitiolle on $2^m\, m!$ kappaletta, ja näin saadaan uudelleen johdettua paripartitioiden lukumäärä

$$\frac{\#S_{2m}}{2^m\, m!} = \frac{(2m)!}{2^m\, m!} = \frac{1 \cdot 2 \cdot 3 \cdots (2m-1) \cdot (2m)}{2 \cdot 4 \cdots (2(m-1)) \cdot (2m)} = 1 \cdot 3 \cdot 5 \cdots (2m-3) \cdot (2m-1)$$

1.1. Wickin kaava gaussisille satunnaismuuttujille

Oletetaan, että $\underline{\xi} = (\xi_1, \ldots, \xi_n)$ gaussinen vektori, joka on *keskitetty* eli pätee $\mathsf{E}[\xi_k] = 0$ kaikilla k. Tällöin gaussisuuden perusteella $\underline{\xi}$ ja $-\underline{\xi}$ ovat samoin jakautuneita, sillä näiden gaussisten vektorien odotusarvovektorit ja kovarianssimatriisit ovat samat. Siksi

$$n \text{ pariton} \quad \Longrightarrow \quad \mathsf{E}[\xi_1\, \xi_2\, \ldots\, \xi_n] = 0.$$

Oletamme siksi usein trivialiteettien välttämiseksi, että n on parillinen.

Todistamme hyödyllisen Wickin kaavan gaussisille odotusarvoille.

Lause IV.6. *Olkoon $n \in \mathbb{N}$ ja $\underline{\xi} = (\xi_1, \ldots, \xi_n)$ gaussinen keskitetty satunnaisvektori. Tällöin pätee*

$$\mathsf{E}[\xi_1\, \xi_2\, \ldots\, \xi_n] = \sum_P \prod_{\{j,k\} \in P} \mathsf{E}[\xi_j \xi_j],$$

missä summaus on yli joukon $[\![1, n]\!] = \{1, 2, \ldots, n\}$ pariositusten P.

Esimerkki IV.7. Jos sovellamme tulosta vektoriin $\underline{\xi} = (\xi_1, \xi_2, \xi_3, \xi_4)$, saamme kaavan

$$\mathsf{E}[\xi_1\, \xi_2\, \xi_3\, \xi_4] = \mathsf{E}[\xi_1\, \xi_2]\, \mathsf{E}[\xi_3\, \xi_4] + \mathsf{E}[\xi_1\, \xi_3]\, \mathsf{E}[\xi_2\, \xi_4] + \mathsf{E}[\xi_1\, \xi_4]\, \mathsf{E}[\xi_2\, \xi_3].$$

Jos sovellamme tätä edelleen vektoriin (X, X, X, X), missä $X \sim \mathrm{N}(0, \sigma^2)$, saamme tutun kaavan

$$\mathsf{E}[X^4] = 3\sigma^4.$$

Samalla tavoin, käyttäen Esimerkissä IV.4 laskettuja pariositusten lukumääriä, saadaan seuraava kaava keskitetyn Gaussisen satunnaismuuttujan $X \sim \mathrm{N}(0, \sigma^2)$ momenteille

$$\mathsf{E}[X^n] = \begin{cases} (n-1)!!\, \sigma^n & \text{jos } n \text{ on parillinen} \\ 0 & \text{jos } n \text{ on pariton} \end{cases}.$$

Lauseen IV.6 todistus. Jos n on pariton, on väite selvä: vasemman puolen odotusarvo nolla, ja oikean puolen summa pariositusten yli tyhjä. Oletamme alla, että n on parillinen.

Kiinnitetään hetkeksi $\underline{\theta} \in \mathbb{R}^n$ ja asetetaan $X = \underline{\theta} \cdot \underline{\xi}$. Tällöin X on normaalijakautunut ja $\mathsf{E}[X] = 0$ ja

$$\sigma(\underline{\theta})^2 = \mathsf{Var}[X] = \sum_{i,j=1}^{n} \theta_i \theta_j \mathsf{E}[\xi_i\, \xi_j].$$

Siksi $\underline{\xi}$:n karakteristinen funktio on

$$\chi_{\underline{\xi}}(\underline{\theta}) = \mathsf{E}[\exp(\mathrm{i}\underline{\theta} \cdot \underline{\xi})] = \exp\left(-\frac{\sigma(\underline{\theta})^2}{2}\right) \tag{IV.1}$$

Todistuksen ideana on laskea odotusarvo $\mathsf{E}[\xi_1\, \xi_2\, \ldots\, \xi_n]$ karakteristista funktiota derivoimalla.

Huomaamme, että

$$(-\mathrm{i})^n \frac{\partial^n}{\partial\theta_1\,\partial\theta_2\,\ldots\partial\theta_n}\chi_{\underline{\xi}}(\theta)\bigg|_{\underline{\theta}=\underline{0}} = \mathsf{E}[\xi_1\,\xi_2\,\ldots\,\xi_n]. \tag{IV.2}$$

Toisaalta voimme kehittää karakteristisessa funktiossa (IV.1) eksponenttifunktion sarjaksi

$$\exp\left(-\frac{\sigma(\underline{\theta})^2}{2}\right) = \sum_{k=0}^{\infty}\frac{(-1)^k}{2^k\,k!}\sigma(\underline{\theta})^{2k}.$$

Jokainen sarjan termi on homogeeninen polynomi ja polynomin $\sigma(\underline{\theta})^{2k}$ aste on $2k$. Niinpä ainoastaan termistä $2k = n$ tulee kontribuutio (IV.2):n vasemmalle puolelle. Siispä helpohkolla laskulla saamme

$$\begin{aligned}\mathsf{E}[\xi_1\,\xi_2\,\ldots\,\xi_n] &= \frac{(-\mathrm{i})^n\,(-1)^{n/2}}{2^{n/2}\,(n/2)!}\frac{\partial^n}{\partial\theta_1\,\partial\theta_2\,\ldots\partial\theta_n}\sigma(\underline{\theta})^n \\ &= \frac{1}{2^{n/2}\,(n/2)!}\sum_{\pi \text{ permutaatio}}\prod_{j=1}^{n/2}\mathsf{E}[\xi_{\pi(2j-1)}\,\xi_{\pi(2j)}].\end{aligned}$$

Esimerkissä IV.5 tarkastelun perusteella huomaamme, että etutekijä $\frac{1}{2^{n/2}\,(n/2)!}$ kumoaa täsmälleen moninkertaisen laskemisen, joka aiheutuu siitä, että yhtä pariositusta vastaa $2^{n/2}\,(n/2)!$ eri permutaatiota. □

Paitsi, että Wickin kaava on hyödyllinen gaussisten momenttien[1] laskemiseksi, on se myös "filosofisesti" tärkeä: kuten jo aiemmin totesimme määräytyy gaussisen vektorin jakauma odotusarvovektorista ja kovarianssimatriisista, mutta nyt meillä on suora tapa kirjoittaa kaikki momentit, kunhan tunnemme "kaksipistefunktiot" eli kovarianssit.

1.2. Bosoninen Wickin kaava

Määritelmä IV.8. Jos V on vektoriavaruus, ja A ja B ovat lineaarioperaattoreita $V \to V$, niin *kommutaattori* $[A, B] = AB - BA$ (oikealla puolella tulo tarkoittaa lineaarikuvausten yhdistämistä) on myös lineaarikuvaus $V \to V$.

Määritelmä IV.9. Olkoon V on vektoriavaruus, ja $(\mathfrak{a}_i)_{i\in J}$ ja $(\mathfrak{a}_i^\dagger)_{i\in J}$ kaksi samalla indeksijoukolla J indeksöityä kokoelmaa lineaarioperaattoreita $V \to V$. Sanomme, että kokoelmat toteuttavat *kanoniset kommutaatiorelaatiot*, jos

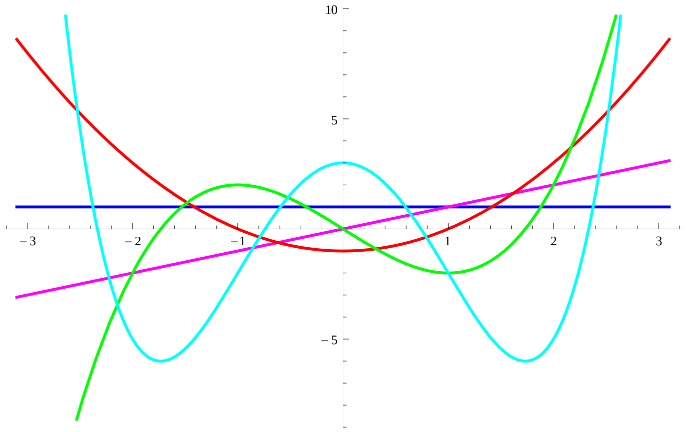
$$[\mathfrak{a}_i, \mathfrak{a}_j] = 0, \qquad [\mathfrak{a}_i^\dagger, \mathfrak{a}_j^\dagger] = 0, \qquad [\mathfrak{a}_i, \mathfrak{a}_j^\dagger] = \delta_{i,j}\,\mathrm{id}_V.$$

Operaattoreita $\mathfrak{a}_i^\dagger$ sanotaan kvanttikenttäteoriassa bosonisiksi *luomisoperaattoreiksi* (liittyeen bosoniseen vapausasteeseen $i \in J$) ja operaattoreita $\mathfrak{a}_i$ vastaavasti *hävitysoperaattoreiksi*.

1.2.1. *Yhden vapausasteen bosoniset luomis- ja hävitysoperaattorit*

Määritelmän IV.9 tapaus, jossa mahdollisia indeksejä on vain yksi, liittyy kvanttimekaaniseen harmoniseen oskillaattoriin. Konstruoimme tässä luomis- ja hävitysoperaattorit tavalla, joka tekee suoraviivaiseksi yhteyden probabilistiseen, satunnaismuuttujan $X \sim \mathrm{N}(0,1)$ momentteja koskevaan tulkintaan. Varoituksena lukijalle huomautamme, että kirjallisuudessa esiintyy useita erilaisia konventioita seuraavanlaisessa konstruktiossa.

[1] *Momentilla* tarkoitamme satunnaismuuttujien kokonaislukupotenssien (ei-negatiivisten) tulon odotusarvoa, kuten vaikka $\mathsf{E}[X^5\,Y\,Z^3]$.



KUVA IV.1. Muutaman ensimmäisen Hermiten polynomin H_n kuvaajat.

Määritellään funktio $\mathfrak{v}_0 \colon \mathbb{R} \to \mathbb{C}$ neliöjuurena standardin gaussisen satunnaismuuttujan todennäköisyystiheydestä,

$$\mathfrak{v}_0(x) = \frac{1}{\sqrt[4]{2\pi}} e^{-\frac{1}{4}x^2}, \tag{IV.3}$$

ja tarkastellaan sellaisten funktioiden avaruutta V, jotka ovat muotoa $f = p \times \mathfrak{v}_0$, missä p on polynomifunktio. Määritellään operaattorit $\mathfrak{a}$ ja $\mathfrak{a}^\dagger$ seuraavasti

$$(\mathfrak{a}f)(x) = \frac{1}{2}xf(x) + f'(x) \qquad \text{ja} \qquad (\mathfrak{a}^\dagger f)(x) = \frac{1}{2}xf(x) - f'(x).$$

Seuraavan tehtävän suoran laskun perusteella nähdään, että $\mathfrak{a}$ ja $\mathfrak{a}^\dagger$ toteuttavat kanonisen kommutaatiorelaation avaruudella V.

Tehtävä IV.1. Osoita, että jos $f \in V$, niin myös $\mathfrak{a}f \in V$ ja $\mathfrak{a}^\dagger f \in V$. Osoita lisäksi, että kaikilla kahdesti derivoituvilla funktioilla f pätee

$$\mathfrak{a}(\mathfrak{a}^\dagger f) - \mathfrak{a}^\dagger(\mathfrak{a}f) = f.$$

Suoralla laskulla myös huomataan, että hävitysoperaattori $\mathfrak{a}$ annihiloi funktion $\mathfrak{v}_0$,

$$(\mathfrak{a}\mathfrak{v}_0)(x) = \frac{1}{2}x\mathfrak{v}_0(x) + \mathfrak{v}_0'(x) = \frac{1}{\sqrt[4]{2\pi}}\Big(\frac{1}{2}xe^{-\frac{1}{4}x^2} + \big(\frac{-1}{4}\big)(2x)e^{-\frac{1}{4}x^2}\Big) = 0.$$

Toisaalta luomisoperaattoria $\mathfrak{a}^\dagger$ toistuvasti funktioon $\mathfrak{v}_0$ soveltaen voidaan määritellä polynomit H_n siten, että

$$(\mathfrak{a}^\dagger)^n\mathfrak{v}_0 = H_n\mathfrak{v}_0.$$

Esimerkki IV.10. Muutama ensimmäinen polynomeista H_n saadaan vaikkapa suorilla laskuilla,

$$H_1(x) = x, \quad H_2(x) = x^2 - 1, \quad H_3(x) = x^3 - 3x, \quad H_4(x) = x^4 - 6x^2 + 3$$

$$H_5(x) = x^5 - 10x^3 + 15, \quad H_6(x) = x^6 - 15x^4 + 45x^2 - 15, \quad \ldots.$$

Kuvassa IV.1 on esitetty polynomien H_n, $n \leq 4$, kuvaajat.

Yleisestikin pätee, kuten helpolla rekursiolla nähdään, että H_n on astetta n oleva polynomi, jonka johtavan termin kerroin on 1, ja joka on parillinen tai pariton kun

n on parillinen tai pariton, vastaavasti.[2] Erityisesti toteamme, että funktiot $(\mathfrak{a}^\dagger)^n \mathfrak{v}_0$, $n \in \mathbb{Z}_{\geq 0}$, muodostavat funktioavaruuden V kannan. Funktiota $\mathfrak{v}_0$ sanotaan kvanttikenttäteorian kielellä vakuumiksi, ja muita kantavektoreita $(\mathfrak{a}^\dagger)^n \mathfrak{v}_0$ viritetyiksi tiloiksi.

Määritellään vielä vakuumia vastaava duaalivektori $\mathfrak{v}_0^* \in V^*$, lineaarikuvaus $V \to \mathbb{C}$, asettamalla kantavektoreille

$$\langle \mathfrak{v}_0^*, (\mathfrak{a}^\dagger)^n \mathfrak{v}_0 \rangle = \begin{cases} 1 & \text{jos } n = 0 \\ 0 & \text{jos } n \neq 0 \end{cases}.$$

Vakuumi $\mathfrak{v}_0$ ja sitä vastaava duaalivektori $\mathfrak{v}_0^*$ toteuttavat

$$\mathfrak{a}\mathfrak{v}_0 = 0 \qquad \text{ja} \qquad \langle \mathfrak{v}_0^*, \mathfrak{a}^\dagger f \rangle = 0 \quad \forall f \in V.$$

Huomautus IV.11. Vaihtoehtoinen yhtäpitävä määritelmä duaalivektorille $\mathfrak{v}_0^*$ olisi kaava

$$\langle \mathfrak{v}_0^*, f \rangle = \int_{\mathbb{R}} \mathfrak{v}_0(x) f(x)\, \mathrm{d}x,$$

josta suhde avaruudessa $L^2(\mathbb{R})$ otettuun ortogonaaliseen projektioon yksikkövektorin $\mathfrak{v}_0$ virittämälle aliavaruudelle olisi ilmeisempi. Lisäksi, koska funktiot $f \in V$ ovat muotoa $f(x) = p(x)\mathfrak{v}_0(x)$, missä p on polynomi, ja koska $\mathfrak{v}_0(x)^2 = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{-\frac{1}{2}x^2}$ on standardin gaussisen satunnaismuuttujan $X \sim \mathrm{N}(0,1)$ todennäköisyystiheys, näemme tästä, että $\langle \mathfrak{v}_0^*, f \rangle = \mathsf{E}[p(X)]$. Yhteys gaussisten momenttien laskemiseen demystifioituu.

1.2.2. *Äärellisen monen vapausasteen bosoniset luomis- ja hävitysoperaattorit*

Luvun 1.2.1 konstruktio yleistyy suoraviivaisesti d-ulotteiseen tapaukseen. Määritellään vektoriavaruus

$$V = \Big\{ f \colon \mathbb{R}^d \to \mathbb{C} \;\Big|\; f(x_1, \ldots, x_d) = p(x_1, \ldots, x_d)\, e^{-\frac{1}{4}\sum_{i=1}^d x_i^2} \text{ jollakin muuttujien } x_1, \ldots, x_d \text{ polynomilla } p \Big\},$$

ja siellä kaikilla $i = 1, \ldots, d$ lineaarioperaattorit $\mathfrak{a}_i \colon V \to V$ ja $\mathfrak{a}_i^\dagger \colon V \to V$ kaavoilla

$$(\mathfrak{a}_i f)(x_1, \ldots, x_d) = \frac{1}{2} x_i f(x_1, \ldots, x_d) + \frac{\partial}{\partial x_i} f(x_1, \ldots, x_d) \qquad \text{ja}$$
$$(\mathfrak{a}_i^\dagger f)(x_1, \ldots, x_d) = \frac{1}{2} x_i f(x_1, \ldots, x_d) - \frac{\partial}{\partial x_i} f(x_1, \ldots, x_d).$$

Vakuumivektori $\mathfrak{v}_0 \in V$ määritellään standardin d-ulotteisen gaussisen todennäköisyystiheyden neliöjuurena

$$\mathfrak{v}_0(x_1, \ldots, x_d) = (2\pi)^{-d/4}\, e^{-\frac{1}{4}\sum_{i=1}^d x_i^2}.$$

Vektori $\mathfrak{v}_0$ on yksikkövektori Hilbertin avaruudessa $L^2(\mathbb{R}^d)$, ja duaalivakuumivektori $\mathfrak{v}_0^*$ määritellään käyttäen ortogonaalista projektiota vektorin $\mathfrak{v}_0$ virittämälle yksiylotteiselle aliavaruudelle,

$$\langle \mathfrak{v}_0^*, f \rangle = \int_{\mathbb{R}^d} \mathfrak{v}_0(\underline{x}) f(\underline{x})\, \mathrm{d}^d \underline{x}.$$

[2] Polynomit H_n, $n \in \mathbb{N}$, tunnetaan Hermiten polynomeina — ne ovat gaussisen painon $e^{-\frac{1}{2}x^2}$ suhteen ortogonaaliset polynomit, kuten lukija tämän luvun havainnoilla voi vaivatta itsekin todistaa.

Kuten yllä, todetaan seuraavat ominaisuudet:

$$\forall i, j: \qquad [\mathfrak{a}_i, \mathfrak{a}_j] = 0, \quad [\mathfrak{a}_i^\dagger, \mathfrak{a}_j^\dagger] = 0, \quad [\mathfrak{a}_i, \mathfrak{a}_j^\dagger] = \delta_{i,j}\, \mathrm{id}_V \tag{IV.4}$$

$$\forall i: \qquad \mathfrak{a}_i\, \mathfrak{v}_0 = 0 \tag{IV.5}$$

$$\forall i,\ \forall f \in V: \qquad \langle \mathfrak{v}_0^*,\ \mathfrak{a}_i^\dagger f \rangle = 0. \tag{IV.6}$$

1.2.3. *Algebrallinen bosoninen Wickin kaava*

Lauseelle IV.6 analoginen algebrallinen tulos on seuraava.

Lause IV.12. *Olkoon V vektoriavaruus, $(\mathfrak{a}_i)_{i\in[\![1,d]\!]}$ ja $(\mathfrak{a}_i^\dagger)_{i\in[\![1,d]\!]}$ lineaarikuvauksia $V \to V$, jotka toteuttavat kanoniset kommutaatiorelaatiot* (IV.4)*, $\mathfrak{v}_0 \in V$ vektori, joka toteuttaa* (IV.5)*, ja $\mathfrak{v}_0^* \in V$ duaalivektori, joka toteuttaa normalisaation $\langle \mathfrak{v}_0^*,\ \mathfrak{v}_0 \rangle = 1$ ja ominaisuuden* (IV.6)*. Jos on annettu operaattorit ϕ_j, $j = 1, \ldots, n$, jotka ovat lineaarikombinaatoita*

$$\phi_j = \sum_{i=1}^{d} \Big(c_j^{(i)} \mathfrak{a}_i^\dagger + d_j^{(i)} \mathfrak{a}_i \Big),$$

ja määritellään kontraktiot $\langle \phi_j \phi_k \rangle := \langle \mathfrak{v}_0^*,\ \phi_j \phi_k \mathfrak{v}_0 \rangle$ kun $j < k$, niin pätee seuraava kaavaa

$$\langle \mathfrak{v}_0^*,\ \phi_1 \phi_2 \cdots \phi_n\, \mathfrak{v}_0 \rangle = \sum_P \prod_{\{j,k\} \in P} \langle \phi_j \phi_k \rangle,$$

missä summaus on yli joukon $[\![1, n]\!] = \{1, 2, \ldots, n\}$ pariositusten P ja parit $\{j, k\} \in P$ valitaan esitettäviksi niin, että $j < k$.

Todistus. Jaetaan ensin operaattori ϕ_j luomis- ja hävitysosiin

$$\phi_j = \phi_j^{\boxplus} + \phi_j^{\boxminus}, \qquad \text{missä} \qquad \phi_j^{\boxplus} = \sum_{i=1}^{d} c_j^{(i)} \mathfrak{a}_i^\dagger \qquad \text{ja} \qquad \phi_j^{\boxminus} = \sum_{i=1}^{d} d_j^{(i)} \mathfrak{a}_i.$$

Huomataan sitten, että kommutaattori $[\phi_j^{\boxminus}, \phi_k] = [\phi_j^{\boxminus}, \phi_k^{\boxplus}]$ on indentiteettioperaattorin skalaarimoninkerta. Toisaalta, käyttäen ominaisuuksia (IV.6) ja (IV.5), kontraktiot voidaan laskea kommutoimalla annihilaatio-operaattorit oikealle seuraavasti

$$\langle \phi_j \phi_k \rangle = \langle \mathfrak{v}_0^*,\ \phi_j \phi_k \mathfrak{v}_0 \rangle = \langle \mathfrak{v}_0^*,\ \phi_j^{\boxminus} \phi_k \mathfrak{v}_0 \rangle = \langle \mathfrak{v}_0^*,\ \big([\phi_j^{\boxminus}, \phi_k] + \phi_k \phi_j^{\boxminus}\big) \mathfrak{v}_0 \rangle = \langle \mathfrak{v}_0^*,\ [\phi_j^{\boxminus}, \phi_k] \mathfrak{v}_0 \rangle.$$

Moninkerran arvo on tämän perusteella täsmälleen kontraktio — saamme

$$[\phi_j^{\boxminus}, \phi_k] = \langle \phi_j \phi_k \rangle\, \mathrm{id}_V.$$

Väite todistetaan nyt induktiolla vasemmalla puolella esiintyvien operaattorien ϕ_j lukumäärän n suhteen. Kun $n = 0$ tai $n = 1$, väite on selvä. Kun $n \geq 2$, voidaan laskea, jälleen käyttämällä ominaisuutta (IV.6) ja kommutoimalla annihilaatio-operaattorit oikealle

$$\begin{aligned}
\langle \mathfrak{v}_0^*,\ \phi_1 \phi_2 \cdots \phi_n \mathfrak{v}_0 \rangle &= \langle \mathfrak{v}_0^*,\ \phi_1^{\boxminus} \phi_2 \cdots \phi_n \mathfrak{v}_0 \rangle \\
&= \langle \mathfrak{v}_0^*,\ \phi_2 \cdots \phi_n \phi_1^{\boxminus} \mathfrak{v}_0 \rangle + \sum_{k=2}^{n} \langle \mathfrak{v}_0^*,\ \phi_2 \cdots \phi_{k-1} [\phi_1^{\boxminus}, \phi_k] \phi_{k+1} \cdots \phi_n \mathfrak{v}_0 \rangle \\
&= 0 + \sum_{k=2}^{n} \langle \phi_1 \phi_k \rangle\, \langle \mathfrak{v}_0^*,\ \phi_2 \cdots \phi_{k-1} \phi_{k+1} \cdots \phi_n \mathfrak{v}_0 \rangle.
\end{aligned}$$

Oikealla puolella esiintyy nyt samaa muotoa oleva lauseke, jossa operaattorien lukumäärä on $n-2$. Voidaan käyttää induktio-oletusta, ja kirjoittaa

$$\langle \mathfrak{v}_0^*,\, \phi_1\phi_2\cdots\phi_n\mathfrak{v}_0\rangle = \sum_{k=2}^{n}\langle\phi_1\phi_k\rangle \sum_{P'}\prod_{\{j',k'\}\in P'}\langle\phi_{j'}\phi_{k'}\rangle,$$

missä summa on yli joukon $[\![1,n]\!]\setminus\{1,k\}$ pariositusten P', joiden parit $\{j',k'\}$ on valittu esitettäviksi niin, että $j'<k'$. Tämä lauseke on selvästi sama kuin haluttu summa yli kaikkien $[\![1,n]\!]$ pariositusten P, ryhmiteltynä alkion 1 parin k mukaan. □

Jätämme lukijalle harjoitustehtäväksi antaa vaihtoehtoinen algebrallinen todistus probabilistiselle Wickin kaavalle, eli Lauseelle IV.6, käyttäen Luvun 1.2.2 konstruktiota ja Lausetta IV.12

1.3. Fermioninen Wickin kaava

Määritelmä IV.13. Jos V on vektoriavaruus, ja A ja B ovat lineaarioperaattoreita $V\to V$, niin *antikommutaattori* $[A,B]_+ = AB+BA$ (oikealla puolella tulo tarkoittaa lineaarikuvausten yhdistämistä) on myös lineaarikuvaus $V\to V$.

Määritelmä IV.14. Olkoon V on vektoriavaruus, ja $(\mathfrak{b}_i)_{i\in J}$ ja $(\mathfrak{b}_i^\dagger)_{i\in J}$ kaksi samalla indeksijoukolla J indeksöityä kokoelmaa lineaarioperaattoreita $V\to V$. Sanomme, että kokoelmat toteuttavat *kanoniset antikommutaatiorelaatiot*, jos

$$[\mathfrak{b}_i,\mathfrak{b}_j]_+ = 0, \qquad [\mathfrak{b}_i^\dagger,\mathfrak{b}_j^\dagger]_+ = 0, \qquad [\mathfrak{b}_i,\mathfrak{b}_j^\dagger] = \delta_{i,j}\,\mathrm{id}_V.$$

Operaattoreita $\mathfrak{b}_i^\dagger$ sanotaan kvanttikenttäteoriassa fermionisiksi *luomisoperaattoreiksi* (liittyeen fermioniseen vapausasteeseen $i\in J$) ja operaattoreita $\mathfrak{b}_i$ vastaavasti *hävitysoperaattoreiksi*.

Vastaavasti kuin bosonisessa tapauksessa, lähtökohtana fermioniselle Wickin kaavalle tulee olla vektoriavaruus V, kokoelmat $(\mathfrak{b}_i)_{i\in[\![1,d]\!]}$ ja $(\mathfrak{b}_i^\dagger)_{i\in[\![1,d]\!]}$ lineaarikuvauksia $V\to V$, vakuumivektori $\mathfrak{v}_0\in V$, ja duaalivakuumivektori $\mathfrak{v}_0^*\in V$, jolle $\langle\mathfrak{v}_0^*,\,\mathfrak{v}_0\rangle = 1$. Näiden tulee toteuttaa seuraavat ominaisuudet

$$\forall i,j: \qquad [\mathfrak{b}_i,\mathfrak{b}_j]_+ = 0, \quad [\mathfrak{b}_i^\dagger,\mathfrak{b}_j^\dagger]_+ = 0, \quad [\mathfrak{b}_i,\mathfrak{b}_j^\dagger]_+ = \delta_{i,j}\,\mathrm{id}_V \tag{IV.7}$$

$$\forall i: \qquad \mathfrak{b}_i\,\mathfrak{v}_0 = 0 \tag{IV.8}$$

$$\forall i,\ \forall v\in V: \qquad \langle\mathfrak{v}_0^*,\,\mathfrak{b}_i^\dagger v\rangle = 0. \tag{IV.9}$$

Seuraavassa harjoituksessa osoitetaan, että vektoriavaruudessa V jonka dimensio on $\dim(V) = 2^d$, tällaiset operaattorit ja vektorit todella on olemassa.[3]

[3]Tämä voidaan ymmärtää esitysteorian kielellä seuraavasti. Niinkutsuttu Cliffordin algebra on se algebra, jonka $2d$ generaattoria ja niitä koskevat kanoniset antikommutaatiorelaatiot määrittelevät. Cliffordin algebra on 2^{2d}-ulotteinen algebra. Sillä on ainoastaan yksi redusoitumaton esitys, joka on 2^d-ulotteinen (nimittäin Tehtävässä IV.2 konstruoitu nk. fermioninen Fockin avaruus). Cliffordin algebra on esitysteorian mielessä puoliyksinkertainen, mistä seuraa, että kaikki avaruudet, joilla on olemassa kanoniset antikommutaatiorelaatiot toteuttavat operaattorit (ts. kaikki Cliffordin algebran esitykset) ovat välttämättä suoria summia tämän 2^d-ulotteisen avaruuden kopioista.

Tehtävä IV.2. Olkoon V vektoriavaruus, jolla on kanta $(v_S)_{S\subset[\![1,d]\!]}$ joka on indeksoitu joukon $[\![1,d]\!] = \{1,2,\ldots,d\}$ osajoukoilla S. Olkoot $\mathfrak{b}_i^\dagger$ ja $\mathfrak{b}_i$, $i = 1,2,\ldots,d$, sellaiset lineaarikuvaukset $V \to V$, joille

$$\mathfrak{b}_i^\dagger\, v_S = \begin{cases} 0 & \text{jos } i \in S \\ (-1)^{\#(S\cap[\![1,i-1]\!])}\, v_{S\cup\{i\}} & \text{jos } i \notin S \end{cases} \qquad \text{ja}$$

$$\mathfrak{b}_i\, v_S = \begin{cases} (-1)^{\#(S\cap[\![1,i-1]\!])} v_{S\setminus\{i\}} & \text{jos } i \in S \\ 0 & \text{jos } i \notin S \end{cases}.$$

(a) Osoita, että kaikilla i, j ylläolevien lineaarikuvausten antikommutaattorit ovat

$$[\mathfrak{b}_i, \mathfrak{b}_j]_+ = 0, \qquad [\mathfrak{b}_i^\dagger, \mathfrak{b}_j^\dagger]_+ = 0, \qquad [\mathfrak{b}_i, \mathfrak{b}_j^\dagger]_+ = \delta_{i,j}\,\mathrm{id}_V.$$

(b) Määritellään $v^* \in V^*$ kaavalla $\langle v^*, v_S\rangle = \delta_{S,\emptyset}$. Osoita, että vektori $v_\emptyset$ ja duaalivektori v^* toteuttavat

$$\mathfrak{b}_i\, v_\emptyset = 0 \quad \forall i, \qquad \text{ja} \qquad \langle v^*,\, \mathfrak{b}_i^\dagger\, v\rangle = 0 \quad \forall i\; \forall v \in V.$$

1.3.1. *Pfaffiaanit ja pariositusten merkit*

Fermionisella Wickin kaavalla on pieni, mutta merkityksellinen ero bosoniseen Wickin kaavaan nähden: pariosituksia vastaavat termit esiintyvät joko plus- tai miinusmerkeillä. Järjestetyn joukon pariosituksen merkin määrittelemiseksi teemme muutamia valmisteluja.

Määritelmä IV.15. Jos $A \in \mathbb{C}^{2m\times 2m}$ on antisymmetrinen matriisi, $A_{i,j} = -A_{j,i}$ kaikilla i, j, niin määritellään sen *Pfaffiaani* kaavalla

$$\mathrm{Pf}(A) = \frac{1}{2^m\, m!} \sum_{\pi\in S_{2m}} \mathrm{sgn}(\pi) \prod_{l=1}^{m} A_{\pi(2l-1),\pi(2l)}. \tag{IV.10}$$

Jos $A \in \mathbb{C}^{n\times n}$ on antisymmetrinen matriisi, jonka koko n on pariton, tulkitaan $\mathrm{Pf}(A) = 0$.

Kokoa $2m \times 2m$ olevan antisymmetrisen matriisin A Pfaffiaani $\mathrm{Pf}(A)$ on astetta m oleva polynomi matriisialkioissa $A_{j,k}$. Determinantti $\det(A)$ on silloin vastaavasti astetta $2m$ oleva polynomi. Voidaan osoittaa, että Pfaffiaanin neliö on determinantti, ja suorien kombinatoristen sovellusten lisäksi tämä onkin yksi tärkeimmistä syistä tutkia Pfaffiaania. Emme kuitenkaan varsinaisesti tarvitse tätä tietoa, joten jätämme myös sen todistamisen lukijan harrastuneisuuden varaan.

Tehtävä IV.3. Osoita, että antisymmetriselle matriisille $A \in \mathbb{C}^{n\times n}$ pätee $\det(A) = \big(\mathrm{Pf}(A)\big)^2$.

Pfaffiaanin määritelmässä (IV.10) esiintyvistä merkeistä teemme aluksi seuraavat huomiot.

Lemma IV.16. *Kun permutaatioihin $\pi \in S_{2m}$ liitetään pariositukset*

$$P = \{\{\pi(1), \pi(2)\}, \ldots, \{\pi(2m-1), \pi(2m)\}\}$$

kuten Esimerkissä IV.5, niin pätee:

(a) *Jos permutaatiot π ja π' ovat sellaiset, että niihin liittyvä pariositus on sama, ja lisäksi $\pi(2l-1) < \pi(2l)$ ja $\pi'(2l-1) < \pi'(2l)$ kaikilla $l = 1, \ldots, m$, niin $\mathrm{sgn}(\pi) = \mathrm{sgn}(\pi')$.*

(b) *Jos $A \in \mathbb{C}^{2m\times 2m}$ on antisymmetrinen matriisi, niin kaikille permutaatioille $\pi \in S_{2m}$, joihin liittyy sama pariositus, lausekkeen $\mathrm{sgn}(\pi)\prod_{l=1}^{m} A_{\pi(2l-1),\pi(2l)}$ arvo on sama.*

Todistus. Esimerkin IV.5 havaintojen perusteella kohdan (a) permutaatiot saadaan toisistaan permutoimalla kokonaisia pareja keskenään. Vaikkapa parien transpositiot generoivat kaikki tällaiset permutaatiot. Selvästi parien transpositio on parillinen permutaatio: yksi parien transpositio koostuu kahdesta alkioiden transpositiosta. Siis kaikki kohdan (a) permutaatiot liittyvät toisiinsa parillisella permutaatiolla, ja niiden merkit ovat siis samat.

Kohta (b) seuraa, kun huomataan, että parien sisällä järjestyksen vaihtaminen muuttaa samalla permutaation merkkiä ja antisymmetrisen matriisin A matriisielementin merkkiä. □

Lemman kohdan (a) perusteella seuraava määritelmä on konsistentti.

Määritelmä IV.17. Joukon $[\![1, 2m]\!]$ pariosituksen P merkki $\mathrm{sgn}(P)$ on minkä tahansa sellaisen permutaation π merkki $\mathrm{sgn}(\pi)$, jolle

$$P = \{\{\pi(1), \pi(2)\}, \ldots, \{\pi(2m-1), \pi(2m)\}\}$$

ja $\pi(2l-1) < \pi(2l)$ kaikilla $l = 1, \ldots, m$.

Lemman kohdan (b) perusteella saadaan sitten seuraava kaava Pfaffiaanille.

Seuraus IV.18. *Jos $A \in \mathbb{C}^{2m\times 2m}$ on antisymmetrinen matriisi, niin*

$$\mathrm{Pf}(A) = \sum_{P} \mathrm{sgn}(P) \prod_{\{j,k\}\in P} A_{j,k}, \tag{IV.11}$$

missä summaus on yli joukon $[\![1, 2m]\!]$ pariositusten P, ja parit $\{j,k\} \in P$ valitaan esitettäviksi siten, että $j < k$.

Tällä kaavalla Pfaffiaani on laskettavissa vain $(2m-1)!!$ termin summana, kun määritelmän (IV.10) kaavassa esiintyy $2^m\, m!$-kertainen määrä termejä, $(2m)!$ kappaletta. Myös antisymmetrisen matriisin determinantille saadaan siis suoraa määritelmää näppärämpi laskukaava.

Esimerkki IV.19. Kokoa 2×2 olevan antisymmetrisen matriisin Pfaffiaani on

$$\mathrm{Pf}\left(\begin{bmatrix} 0 & a \\ -a & 0 \end{bmatrix}\right) = a.$$

Kokoa 4×4 olevan antisymmetrisen matriisin Pfaffiaani on

$$\mathrm{Pf}\left(\begin{bmatrix} 0 & a_{12} & a_{13} & a_{14} \\ -a_{12} & 0 & a_{23} & a_{24} \\ -a_{13} & -a_{23} & 0 & a_{34} \\ -a_{14} & -a_{24} & -a_{34} & 0 \end{bmatrix}\right) = a_{12}a_{34} - a_{13}a_{24} + a_{14}a_{23}.$$

Samaan tapaan kuin determinantti voidaan laskea kehittämällä tietyn rivin tai sarakkeen suhteen, voidaan Pfaffiaani laskea kehittämällä saman rivin ja sarakkeen suhteen allaolevan mukaisesti. Tämä tulos voitaisiin ottaa myös Pfaffiaanin rekursiiviseksi määritelmäksi.

Lemma IV.20. *Olkoon $A \in \mathbb{C}^{2m\times 2m}$ on antisymmetrinen matriisi. Kun $k = 2, 3, \ldots, 2m$, merkitään $A^{(1,k)}$ sitä $2(m-1) \times 2(m-1)$ matriisia, joka saadaan poistamalla rivit 1 ja k sekä sarakkeet 1 ja k, Silloin pätee*

$$\mathrm{Pf}(A) = \sum_{k=2}^{2m} (-1)^k A_{1k} \, \mathrm{Pf}(A^{(1,k)}).$$

Todistus. Todistetaan väite käyttämällä molemmilla puolilla Pfaffiaanille Seurauksessa IV.18 johdettua kaavaa pariositusten avulla. Oikealle puolelle saadaan lauseke

$$\sum_{k=2}^{2m} (-1)^k A_{1,k} \sum_{P'} \mathrm{sgn}(P') \prod_{\{j',k'\}\in P'} A_{j',k'},$$

missä jälkimmäinen summaus on yli joukon $[\![1, 2m]\!] \setminus \{1, k\}$ pariositusten P', ja parit $\{j', k'\} \in P'$ valitaan kirjoitettaviksi niin, että $j' < k'$. Kiinteällä k ja P' matriisielementtien tulo vastaa pariosituksen $P = P' \cup \{\{1, k\}\}$ yli otettua tuloa

$$A_{1,k} \prod_{\{j',k'\}\in P'} A_{j',k'} = \prod_{\{j,k\}\in P} A_{j,k}.$$

Myös merkki on nähdään oikeaksi

$$(-1)^k \, \mathrm{sgn}(P') = \mathrm{sgn}(P)$$

valitsemalla jokin paripartitiota P' esittävä joukon $[\![1, 2m]\!] \setminus \{1, k\}$ permutaatio, tulkitsemalla se luontevasti joukon $[\![1, 2m]\!]$ permutaationa, ja huomaamalla, että $k-2$ transpositiolla tästä saadaan pariositusta $P = P' \cup \{\{1, k\}\}$ esittävä permutaatio. Jokainen joukon $[\![1, 2m]\!]$ pariositus voidaan kirjoittaa yksikäsitteisellä k ja P' tässä muodossa $P = P' \cup \{\{1, k\}\}$. Siis väitetyn yhtälön oikealle ja vasemmalle puolelle on saatu sama lauseke summana yli joukon $[\![1, 2m]\!]$ pariositusten P. $\square$

Pariosituksen merkki on usein kätevintä laskea yhdistämällä pariosituksen mukaisesti pisteet $1, 2, \ldots, 2m$ pareittain poluilla ylemmässä puolitasossa, ja laskemalla polkujen leikkauksien lukumäärä. Kunhan polut eivät kosketa toisiaan tangentiaalisesti, leikkausten lukumäärä on parillinen täsmälleen jos $\mathrm{sgn}(P) = 1$ ja pariton jos $\mathrm{sgn}(P) = -1$. Seuraava harjoitus on tämän menetelmän formaalimpi muotoilu.

Tehtävä IV.4. Osoita, että joukon $[\![1, 2m]\!]$ pariosituksen P merkki $\mathrm{sgn}(P)$ on sama kuin tulon

$$\prod_{\substack{\{j,k\},\{j',k'\}\in P \\ \{j,k\}\neq\{j',k'\}}} (j-j')(k-k')(j-k')(k-j'))$$

merkki.

1.3.2. *Algebrallinen fermioninen Wickin kaava*

Lause IV.21. *Olkoon V vektoriavaruus, $(\mathfrak{b}_i)_{i\in[\![1,d]\!]}$ ja $(\mathfrak{b}_i^\dagger)_{i\in[\![1,d]\!]}$ lineaarikuvauksia $V \to V$, jotka toteuttavat kanoniset antikommutaatiorelaatiot* (IV.7), *$\mathfrak{v}_0 \in V$ vektori, joka toteuttaa* (IV.8), *ja $\mathfrak{v}_0^* \in V$ duaalivektori, joka toteuttaa normalisaation $\langle \mathfrak{v}_0^*, \mathfrak{v}_0 \rangle = 1$ ja ominaisuuden* (IV.9). *Jos on annettu operaattorit ψ_j, $j = 1, \ldots, n$, jotka ovat lineaarikombinaatoita*

$$\psi_j = \sum_{i=1}^{d} \left(c_j^{(i)} \mathfrak{b}_i^\dagger + d_j^{(i)} \mathfrak{b}_i \right),$$

ja määritellään kontraktiot $\langle\psi_j\psi_k\rangle := \langle\mathfrak{v}_0^*,\, \psi_j\psi_k\mathfrak{v}_0\rangle$ *kun* $j<k$*, niin pätee seuraava kaavaa*

$$\langle\mathfrak{v}_0^*,\, \psi_1\psi_2\cdots\psi_n\,\mathfrak{v}_0\rangle = \sum_P \operatorname{sgn}(P) \prod_{\{j,k\}\in P} \langle\psi_j\psi_k\rangle,$$

missä summaus on yli joukon $[\![1,n]\!] = \{1,2,\ldots,n\}$ *pariositusten* P *ja parit* $\{j,k\}\in P$ *valitaan esitettäviksi niin, että* $j<k$*.*

Todistus. Jaetaan ensin operaattori ψ_j luomis- ja hävitysosiin

$$\psi_j = \psi_j^{\boxplus} + \psi_j^{\boxminus}, \qquad \text{missä} \qquad \psi_j^{\boxplus} = \sum_{i=1}^{d} c_j^{(i)}\mathfrak{b}_i^\dagger \qquad \text{ja} \qquad \psi_j^{\boxminus} = \sum_{i=1}^{d} d_j^{(i)}\mathfrak{b}_i.$$

Kuten Lauseen IV.12 todistuksessa, huomataan, että seuraava antikommutaattori on identiteettioperaattorin skalaarimoninkerta

$$[\psi_j^{\boxminus}, \psi_k]_+ = \langle\psi_j\psi_k\rangle\,\mathrm{id}_V.$$

Väite todistetaan jälleen rekursiivisella laskulla, jonka yhdessä vaiheessa vasemmalla puolella esiintyvien operaattorien ψ_j lukumäärä vähentyy kahdella. Kun $n=0$ tai $n=1$, väite on selvä. Kun $n\geq 2$, voidaan laskea, käyttämällä ominaisuutta (IV.9) ja antikommutoimalla fermioniset annihilaatio-operaattorit oikealle

$$\begin{aligned}
&\langle\mathfrak{v}_0^*,\, \psi_1\psi_2\cdots\psi_n\mathfrak{v}_0\rangle = \langle\mathfrak{v}_0^*,\, \psi_1^{\boxminus}\psi_2\cdots\psi_n\mathfrak{v}_0\rangle \\
&= (-1)^{n-1}\langle\mathfrak{v}_0^*,\, \psi_2\cdots\psi_n\psi_1^{\boxminus}\mathfrak{v}_0\rangle + \sum_{k=2}^{n}(-1)^k\langle\mathfrak{v}_0^*,\, \psi_2\cdots\psi_{k-1}[\psi_1^{\boxminus},\psi_k]_+\psi_{k+1}\cdots\psi_n\mathfrak{v}_0\rangle \\
&= 0 + \sum_{k=2}^{n}(-1)^k\langle\psi_1\psi_k\rangle\,\langle\mathfrak{v}_0^*,\, \psi_2\cdots\psi_{k-1}\psi_{k+1}\cdots\psi_n\mathfrak{v}_0\rangle.
\end{aligned}$$

Tämä lasku antaa lausekkeille $\langle\mathfrak{v}_0^*,\, \psi_1\psi_2\cdots\psi_n\mathfrak{v}_0\rangle$ saman rekursion kuin Lemma IV.20 antaa Pfaffiaaneille. Väite seuraa. □