Goldstone-Effekte und Korrelationslängen des dreidimensionalen O(4)-Spinmodells

Diplomarbeit

Fakultät für Physik
Universität Bielefeld

vorgelegt von
Lars Fromme

27. Februar 2002

Inhaltsverzeichnis

Abbildungsverzeichnis

Einleitung

Phasenübergänge treten in vielen unterschiedlichen Teilgebieten der Physik auf. Aus einer kleinen Änderung eines Parameters resultiert dabei eine gravierende Veränderung der makroskopischen Eigenschaften der Materie. Das wohl bekannteste Beispiel eines Phasenübergangs ist die Änderung des Aggregatzustandes von flüssig zu gasförmig bei der Erwärmung von Wasser. Aber auch in der Elementarteilchenphysik spielen Phasenübergänge eine wichtige Rolle, da sie aus der spontanen Brechung einer Symmetrie der Lagrangedichte resultieren.
Die Quantenchromodynamik (QCD) ist die fundamentale Theorie der starken Wechselwirkung. Sie beschreibt die Wechselwirkung zwischen den Quarks, den nach heutigem Kenntnisstand kleinsten Bausteinen der Materie, und den Gluonen. Die Quarks sind Fermionen und können in sechs verschiedenen Arten (*flavours*) vorkommen. Außerdem tragen sie neben ihrer elektrischen Ladung als zusätzlichen Freiheitsgrad eine Farbladung (*colour*). Die Kraft zwischen ihnen wird durch die Gluonen vermittelt, die ebenfalls eine Farbladung tragen, so daß auch eine Wechselwirkung dieser Austauschbosonen untereinander stattfindet.
Man geht heute davon aus, daß kurz nach dem Urknall zunächst ein Quark-Gluon-Plasma (QGP) existierte, in dem sich Quarks und Gluonen quasifrei bewegen konnten. Bei kleinen Abständen, d. h. großen Impulsüberträgen bzw. hohen Temperaturen, wechselwirken die Farbladungsträger kaum, was als *asymptotische Freiheit* oder *Deconfinement* bezeichnet wird. Mit zunehmender Expansion bzw. Abkühlung kam es dann ca. $10^{-6}s$ nach dem Urknall möglicherweise zu einem Phasenübergang, und die Materie hadronisierte. In der heutigen hadronischen Welt sind nur farbneutrale Quark-Bindungszustände realisiert, d. h., es können keine freien Quarks und Gluonen einzeln nachgewiesen werden. Die Anziehungskraft zwischen den Quarks wächst dabei linear mit dem Abstand - dieses Phänomen wird als *Confinement* bezeichnet.
Die Untersuchung dieses Übergangs von der Hochtemperatur- zur Tieftemperaturphase ist von großem Interesse. Es gibt mittlerweile Versuche an großen Teilchenbeschleunigern, durch Schwerionenstöße bei hohen Energien ein freies QGP zu erzeugen, das dann abkühlt und den Deconfinement-Confinement-Übergang durchläuft. Außerdem kann auch mit Hilfe der Gittereichtheorie der Übergang simuliert werden, doch die Simulationen sind selbst auf großen Parallelcomputern sehr zeitintensiv.
Es lassen sich aber auch viele Erkenntnisse aus der Betrachtung spezieller Grenzfälle

gewinnen, auch wenn diese so in der Natur nicht realisiert sind. Im Grenzfall unendlich großer Quarkmassen, der sogenannten *Valenzquark-Approximation*, ist die relevante Symmetrie, die gebrochen wird, eine globale Z(3)-Symmetrie, die aus der lokalen $SU(N_c)$-Colour-Symmetrie mit $N_c = 3$ Farbladungen resultiert. Im Grenzfall verschwindender Quarkmassen dagegen besitzt die Lagrangedichte für N_f Flavours eine chirale $SU_R(N_f) \times SU_L(N_f) \times U_{R+L}(1)$-Symmetrie. Am Übergangspunkt wird diese spontan zu einer $SU_{R+L}(N_f) \times U_{R+L}(1)$-Symmetrie gebrochen, indem sich in der hadronischen Phase das sogenannte chirale Kondensat, ein Bindungszustand von einem Quark und einem Antiquark, bildet.
Der chirale Phasenübergang für den Fall $N_f = 2$ ist besonders interessant, da die *up*- und *down*-Quarks im Vergleich zu den übrigen Quarks eine sehr geringe Masse haben. Sie spielen für die Thermodynamik eine besondere Rolle, denn die Beiträge der schwereren Quarks werden exponentiell mit deren Masse stark unterdrückt. Durch die Untersuchung des O(4)-symmetrischen Spinmodells, das einen Phasenübergang zweiter Ordnung hat, können auch Aussagen über das kritische Verhalten der QCD mit zwei masselosen Quarkflavours in der Nähe des chiralen Phasenübergangs getroffen werden.
Eine Begründung hierfür liefert die Renormierungsgruppentheorie, mit der unterschiedliche physikalische Systeme mit gleichen kritischen Verhalten in einer sogenannten Universalitätsklasse zusammengefaßt werden können. Systeme in derselben Klasse haben die gleichen kritischen Exponenten und gleiche universelle Amplitudenverhältnisse. Vieles deutet darauf hin, daß die QCD in $3+1$ Dimensionen für zwei masselose Quarkflavours in derselben Universalitätsklasse wie das O(4)-symmetrische Spinmodell in drei Dimensionen liegt [1, 2].
Dies ist aber nur eine Motivation, das O(4)-Spinmodell genauer zu untersuchen. Hier gewonnene Resultate sind auch für andere Modelle aus der Quantenfeldtheorie interessant. Es existieren bereits numerische Resultate zur Bestimmung der kritischen Exponenten dieses Modells, und auch das Verhalten einiger Observablen, wie z. B. der Magnetisierung oder der Suszeptibilität, wurden numerisch überprüft (siehe z. B. [3, 4]). Eine weitere wichtige Größe ist die Korrelationslänge, die numerisch nicht einfach zu bestimmen ist.
In dieser Arbeit werden verschiedene Verfahren zur Bestimmung der Korrelationslänge getestet und miteinander verglichen. Außerdem werden, soweit möglich, existierende theoretische Vorhersagen zum Verhalten der Korrelationslänge in der Nähe des kritischen Punktes numerisch überprüft.
Der Aufbau der Arbeit ist folgender. Im ersten Kapitel werden allgemein O(N)-Spinmodelle mit äußerem Feld sowie ihre Observablen vorgestellt. Außerdem wird als zentraler Punkt der sogenannte Goldstone-Effekt beschrieben und auf den Zusammenhang des O(4)-Modells mit der QCD eingegangen.
Das zweite Kapitel befaßt sich mit kritischen Phänomenen. Nach der Klassifikation von Phasenübergängen und Einführung der kritischen Exponenten wird mit Hilfe der Renormierungsgruppentheorie die Universalitätshypothese begründet. Dabei wird insbesondere auf universelle Skalenfunktionen eingegangen.

Das dritte Kapitel beschäftigt sich mit der Korrelationslänge im allgemeinen und den unterschiedlichen Definitionen einer longitudinalen und einer transversalen Korrelationslänge. Es werden die verschiedenen Verfahren, diese zu bestimmen, beschrieben und außerdem die theoretischen Vorhersagen zu dem Verhalten dieser Korrelationslängen diskutiert.
Danach werden die verwendeten Simulationsmethoden und die zur Auswertung der Daten benötigten Verfahren im vierten Kapitel vorgestellt.
Im fünften und letzten Kapitel werden die gewonnenen Daten analysiert. Die verschiedenen Methoden zur Bestimmung der Korrelationslängen werden verglichen und deren Verhalten am kritischen Punkt, in der gebrochenen und der symmetrischen Phase untersucht. Abschließend wird der bisher weder theoretisch vorhergesagte noch numerisch bestimmte Verlauf der zugehörigen Skalenfunktionen angegeben und mit der Skalenfunktion der Korrelationslänge des Isingmodells aus [5], bei dem kein Goldstone-Effekt auftritt, verglichen.

Kapitel 1

O(N)-Spinmodelle

1.1 O(N)-Spinmodelle mit äußerem Feld

Im allgemeinen versteht man unter einem O(N)-Spinmodell ein unter O(N)-Rotationen invariantes σ-Modell. Wir betrachten hier ein d-dimensionales kubisches Gitter mit dem Volumen V und periodischen Randbedingungen. Jeder der Gitterplätze ist mit einem N-komponentigen Einheitsvektor, im folgenden mit Spin $\mathbf{s}_i$ auf Gitterplatz i bezeichnet, besetzt, d. h., wir betrachten das nicht-lineare σ-Modell. Die einzelnen Spins sind also jeweils auf die Länge eins beschränkt ($|\mathbf{s}_i| = 1$), jedoch ist deren Richtung im N-dimensionalen Raum beliebig. Abbildung 1.1 zeigt das zweidimensionale O(2)-Modell als Beispiel.
In diesem System können sich die einzelnen Spins gegenseitig beeinflussen, wobei deren Wechselwirkung invariant unter Drehungen im N-dimensionalen Raum ist. Zusätzlich führen wir noch das äußere Feld $\mathbf{H}$ ein, das die Richtung der Spins ebenfalls beeinflußt. Die Wirkung dieses Modells ist dann definiert durch

$$\beta \mathcal{H} \;=\; -J \sum_{<i,j>} \mathbf{s}_i \, \mathbf{s}_j \;-\; \mathbf{H} \sum_i \mathbf{s}_i, \tag{1.1}$$

wobei die Kopplung J als die inverse Temperatur des Systems betrachtet werden kann und in der ersten Summe nur über nächste Nachbarn ($< i, j >$) auf dem Gitter summiert wird.
Da in unserem Fall J immer positiv sein soll, versuchen sich benachbarte Spins parallel auszurichten. Gleichzeitig ist es für das Gesamtsystem ebenfalls energetisch günstiger, wenn sich alle Spins in Richtung des äußeren Feldes $\mathbf{H}$ ausrichten. Je größer J, oder gleichbedeutend je kleiner die Temperatur T, desto größer ist die Wahrscheinlichkeit dafür, daß zwei benachbarte Spins gleich ausgerichtet sind. Dies

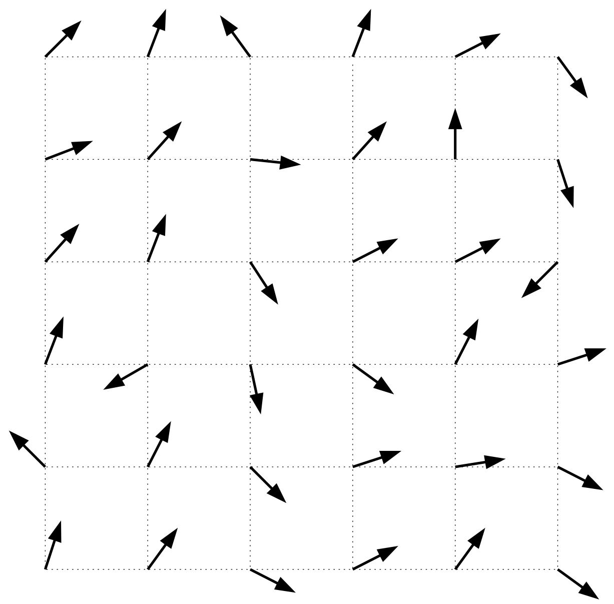


Abbildung 1.1: Zweidimensionales O(2)-Modell.

hat zur Folge, daß für $\mathbf{H} = \mathbf{0}$ unterhalb einer kritischen Temperatur T_c die O(N)-Symmetrie spontan gebrochen wird. Bei Anwesenheit des äußeren Feldes $\mathbf{H}$ ist die ursprüngliche Symmetrie explizit gebrochen, weil Spins in Richtung $\mathbf{H}$ bevorzugt auftreten.
Mit der Wirkung (1.1) ergibt sich die kanonische Zustandssumme

$$Z = \int \mathcal{D}\sigma \, e^{-\beta\mathcal{H}(\sigma)}. \tag{1.2}$$

Integriert wird hier über alle möglichen Zustände σ des Systems.
In den folgenden Kapiteln werden viele Definitionen und Observablen besprochen, die für diese Arbeit relevant sind. Auftretende Erwartungswerte einer Observablen $\mathcal{O}$ sind dabei stets mit Hilfe der Zustandssumme definiert

$$\langle \mathcal{O} \rangle = \frac{1}{Z} \int \mathcal{D}\sigma \, \mathcal{O}(\sigma) \, e^{-\beta\mathcal{H}(\sigma)}. \tag{1.3}$$

1.2 Die Observablen

Mit der Zustandssumme läßt sich die sogenannte freie Energie $F(T, H, V)$ über die Beziehung

$$F = -T \log(Z) \tag{1.4}$$

definieren oder auch die freie mit T normierte Energiedichte $\mathcal{F}(T,H,V)$ gemäß

$$\mathcal{F} \;=\; \frac{F}{V\,T} \;=\; -\frac{1}{V}\;\log(Z). \tag{1.5}$$

Hiermit ergeben sich weitere wichtige thermodynamische Größen. Man erhält die Magnetisierung $\mathbf{M}$ durch die Ableitung der freien Energiedichte nach dem äußeren Feld

$$\mathbf{M} \;=\; -\left(\frac{\partial\mathcal{F}}{\partial\mathbf{H}}\right)_T, \tag{1.6}$$

und die zweifache Ableitung liefert die Suszeptibilitätsmatrix

$$\chi^{ab} \;=\; -\frac{\partial^2\mathcal{F}}{\partial H^a\,\partial H^b} \tag{1.7}$$

mit $a,b=1,...,N$. Für die Wirkung (1.1) ergibt sich

$$\mathbf{M} \;=\; \langle\mathbf{s}\rangle \tag{1.8}$$

und

$$\chi \;=\; \sum_a \chi^{aa} \;=\; V\,\left(\left\langle\mathbf{s}^2\right\rangle - \langle\mathbf{s}\rangle^2\right), \tag{1.9}$$

wobei

$$\mathbf{s} \;=\; \frac{1}{V}\sum_i \mathbf{s}_i \tag{1.10}$$

für das Mittel über das Gitter steht.
Für N>1 ist es sinnvoll, die einzelnen Spinvektoren in jeweils eine parallele (longitudinale) und senkrechte (transversale) Komponenten zu $\mathbf{H}=H\hat{\mathbf{H}}$ gemäß

$$\mathbf{s}_i \;=\; s_i^{\|}\hat{\mathbf{H}} + \mathbf{s}_i^{\perp} \tag{1.11}$$

aufzuspalten, da durch die Anwesenheit des äußeren Feldes eine Richtung besonders ausgezeichnet wird. So verschwindet der Erwartungswert des transversalen Anteils

$$\mathbf{M}^{\perp} \;=\; \left\langle\frac{1}{V}\sum_i \mathbf{s}_i^{\perp}\right\rangle \;=\; \left\langle\mathbf{s}^{\perp}\right\rangle \;=\; 0, \tag{1.12}$$

und der longitudinale Anteil der Magnetisierung ist der Ordnungsparameter des von uns betrachteten Systems. Im folgenden bezeichnen wir diesen als die Magnetisierung M parallel zum angelegten Feld $\mathbf{H}$

$$M \;=\; -\left(\frac{\partial\mathcal{F}}{\partial H}\right)_T \;=\; \left\langle\frac{1}{V}\sum_i s_i^{\|}\right\rangle \;=\; \left\langle s^{\|}\right\rangle. \tag{1.13}$$

Aufgrund der Zerlegung der Spinvektoren in einen longitudinalen und einen transversalen Anteil können auch zwei unterschiedliche Suszeptibilitäten χ_L und χ_T definiert werden, mit deren Hilfe das Verhalten der Magnetisierung beschrieben werden kann. Mit $H^a = H\,\delta^{1a}$, d. h. $\mathbf{H} = (H, 0, ..., 0)$, erhalten wir zum einen die longitudinale über die Beziehung

$$\chi_L \;=\; \chi^{11} \;=\; \left(\frac{\partial M}{\partial H}\right)_T \;=\; V(\left\langle s^{\parallel 2}\right\rangle - M^2) \tag{1.14}$$

und die transversale über

$$\chi_T \;=\; \frac{1}{N-1}(\chi - \chi_L) \;=\; V\frac{1}{N-1}\left\langle \mathbf{s}^{\perp 2}\right\rangle . \tag{1.15}$$

Eine weitere wichtige Größe ist die zusammenhängende Zweipunkt-Korrelationsfunktion G, welche allgemein definiert ist durch

$$G(\mathbf{x}) \;=\; \langle \mathbf{s_0 s_x}\rangle - \langle \mathbf{s_0}\rangle \langle \mathbf{s_x}\rangle . \tag{1.16}$$

Sie gibt die Korrelation zwischen zwei Spins im Abstand $|\mathbf{x}|$ voneinander an. Da aufgrund der Translationsinvarianz $\langle \mathbf{s}_i\rangle$ nicht vom Gitterplatz i abhängt, gilt

$$\langle \mathbf{s}_i\rangle \;=\; \frac{1}{V}\sum_i \langle \mathbf{s}_i\rangle \;=\; \langle \mathbf{s}\rangle \tag{1.17}$$

und damit

$$G(\mathbf{x}) \;=\; \langle \mathbf{s_0 s_x}\rangle - \langle \mathbf{s}\rangle^2 . \tag{1.18}$$

Mit der Zerlegung der Spinvektoren in einen zum angelegten Feld parallelen und einen senkrechten Anteil erhält man die Korrelationsfunktionen

$$G_L(\mathbf{x}) \;=\; \left\langle s^{\parallel}_{\mathbf{0}} s^{\parallel}_{\mathbf{x}}\right\rangle \;-\; \left\langle s^{\parallel}\right\rangle^2 \tag{1.19}$$

und

$$G_T(\mathbf{x}) \;=\; \frac{1}{N-1}\;\left\langle \mathbf{s}^{\perp}_{\mathbf{0}}\,\mathbf{s}^{\perp}_{\mathbf{x}}\right\rangle . \tag{1.20}$$

Diese können durch das Fluktuations-Dissipations-Theorem (vgl. z. B. [6]) mit den Suszeptibilitäten über den Zusammenhang

$$\chi_L \;=\; \widetilde{G}_L(\mathbf{0}) \qquad \text{und} \qquad \chi_T \;=\; \widetilde{G}_T(\mathbf{0}), \tag{1.21}$$

wobei $\widetilde{G}$ für die Fouriertransformierte der Korrelationsfunktion steht, in Verbindung gebracht werden, denn es gilt allgemein

$$\begin{aligned}
\chi \;=\; \widetilde{G}(\mathbf{0}) \;&=\; \sum_{\mathbf{x}} G(\mathbf{x}) \\
&=\; \sum_{\mathbf{x}} \langle \mathbf{s_0 s_x}\rangle - \sum_{\mathbf{x}} \langle \mathbf{s}\rangle^2 \\
&=\; V\left(\left\langle \mathbf{s_0}\frac{1}{V}\sum_{\mathbf{x}} \mathbf{s_x}\right\rangle - \langle \mathbf{s}\rangle^2\right) \\
&=\; V\left(\left\langle \mathbf{s}^2\right\rangle - \langle \mathbf{s}\rangle^2\right) .
\end{aligned} \tag{1.22}$$

Längs einer Raumrichtung fallen die Korrelationsfunktionen exponentiell mit dem Abstand x gemäß

$$G_L(\mathbf{x}) \;\sim\; e^{-x/\xi_L^{exp}} \qquad \text{und} \qquad G_T(\mathbf{x}) \;\sim\; e^{-x/\xi_T^{exp}} \tag{1.23}$$

ab.
Die Bestimmung der sogenannten Korrelationslängen ξ_L^{exp} und ξ_T^{exp} ist ein wesentlicher Teil dieser Arbeit und wird deshalb später noch in einem eigenen Kapitel separat behandelt.

1.3 Der Goldstone-Effekt

Wie bereits erwähnt, ist die Hamiltonfunktion $\mathcal{H}$ ohne äußeres Feld O(N)-symmetrisch. Demnach müßte eigentlich die Magnetisierung für alle Temperaturen T verschwinden, da jeder Zustand mit einer bestimmten Magnetisierungsrichtung gleich wahrscheinlich ist.
Es zeigt sich aber, daß sich für Temperaturen kleiner einer kritischen Temperatur T_c eine spontane Magnetisierung einstellt. Man spricht dann von einer spontanen Symmetriebrechung, da für niedrige Temperaturen der Grundzustand nicht die Symmetrie der Hamiltonfunktion hat. Die Symmetrie ist nicht vollkommen verschwunden, denn der Grundzustand ist für $T < T_c$ entartet, und jeder dieser Grundzustände hat eine O(N-1)-Restsymmetrie in den transversalen Komponenten. Außerdem wird jeder dieser Grundzustände mit der gleichen Wahrscheinlichkeit angenommen, doch die Wahrscheinlichkeit für den Übergang von einem Grundzustand zu einem mit anderer Magnetisierungsrichtung ist nahezu null, da sich dafür ausnahmslos alle Spins gleichzeitig um den gleichen Winkel drehen müßten.
Mit äußerem Feld ist das Modell nicht mehr symmetrisch unter O(N)-Transformationen, die Symmetrie ist explizit gebrochen. Doch für den Grenzfall $H \to 0$ ergibt sich der Fall der spontanen Symmetriebrechung für $T < T_c$. Für verschwindendes äußeres Feld existieren angeregte Zustände, die sogenannten Goldstone-Moden, deren Energie nur geringfügig höher als die der Grundzustände ist. Die Anregungen sind sehr langwellige Spinwellen in den (N-1) transversalen Komponenten, bei denen sich die Richtungen benachbarter Spins nur minimal unterscheiden (Abbildung 1.2), wodurch Korrelationen zwischen den einzelnen Spins erzeugt werden. Die Wellenlänge der Spinwellen wächst mit abnehmendem Feld, bis sie für $H = 0$ divergiert. Auch die Suszeptibilität als indirektes Maß der Korrelation divergiert auf der Koexistenzlinie ($T < T_c, H = 0$).
Die longitudinale Suszeptibilität

$$\chi_L \;=\; \frac{\partial M}{\partial H} \tag{1.24}$$

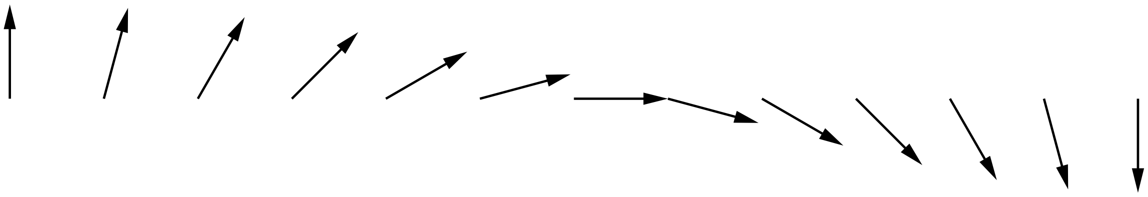


Abbildung 1.2: Spinwelle der transversalen Komponente im O(N)-Modell entlang einer Raumrichtung.

ist für kleine Felder proportional zu $H^{-1/2}$, während sich dagegen für die transversale Suszeptibilität aufgrund des Goldstone-Effektes

$$\chi_T \;=\; \frac{M}{H} \tag{1.25}$$

ergibt. Die Tatsache, daß χ_T für $H = 0$ divergiert, bedeutet, daß der Zustand bei $H = 0$ nicht stabil gegenüber infinitesimalen, zu $\mathbf{M}$ senkrechten Fluktuationen ist. Der Zusammenhang (1.25) läßt sich mit einer kurzen Überlegung leicht herleiten. Das äußere Feld $\mathbf{H} = H\hat{\mathbf{H}}$ bewirkt eine Magnetisierung des Systems $\mathbf{M} = M\hat{\mathbf{H}}$ in dieselbe Richtung. Wird das Feld nun um einen infinitesimalen Vektor $\delta\mathbf{H} \perp \mathbf{H}$ geändert

$$\mathbf{H}' \;=\; \mathbf{H} + \delta\mathbf{H}, \tag{1.26}$$

so läßt sich $\delta\mathbf{H}$ durch

$$\delta\mathbf{H} \;=\; H\left(\hat{\mathbf{H}}' - \hat{\mathbf{H}}\right) \tag{1.27}$$

ausdrücken, da der Betrag des Feldes wegen $\mathbf{H}\,\delta\mathbf{H} = 0$ erhalten bleibt. Der Betrag der Magnetisierung ist nur abhängig vom Betrag des Feldes und bleibt somit ebenfalls unverändert. Die Änderung der Magnetisierung $\delta\mathbf{M}$ kann dann als

$$\delta\mathbf{M} \;=\; \mathbf{M}' - \mathbf{M} \;=\; M\left(\hat{\mathbf{H}}' - \hat{\mathbf{H}}\right) \tag{1.28}$$

geschrieben werden. $\delta\mathbf{M}$ beschreibt eine infinitesimale Änderung der transversalen Magnetisierung, da $\delta\mathbf{M}$ sekrecht zur ursprünglichen (longitudinalen) Magnetisierung steht. Mit (1.27) und (1.28) ergibt sich dann für die transversale Suszeptibilität die Beziehung

$$\chi_T \;=\; \frac{\delta\mathbf{M}}{\delta\mathbf{H}} \;=\; \frac{M}{H}. \tag{1.29}$$

Eine formalere Herleitung dieser Beziehung wird beispielsweise in [7] und in [8] über die sogenannten Ward-Identitäten durchgeführt.
Andere Beispiele für Goldstone-Moden sind Phononen in Kristallen, wo die Translationsinvarianz spontan gebrochen wird, oder die π-Mesonen in der QCD bei der spontanen Brechung der chiralen Symmetrie. In der QFT entsprechen diese niedrigen Energiezustände im allgemeinen den Goldstone-Bosonen.

1.4 Zusammenhang mit der QCD

Wie schon in der Einleitung angesprochen, wird angenommen [1, 2], daß das O(4)-Spinmodell zu derselben Universalitätsklasse wie die QCD mit zwei masselosen Quarkflavours gehört.
Die äußeren Parameter des O(4)-Modells (Temperatur und Feld) können mit den Parametern der QCD (Kopplung g und Quarkmasse m_q) über

$$t \;\sim\; \frac{6}{g^2} - \frac{6}{g_c^2(0)} \tag{1.30}$$

und

$$H \;\sim\; m_q\, a\, N_\tau \tag{1.31}$$

in Verbindung gebracht werden [9, 10]. Dabei ist $t = \frac{T-T_c}{T_0}$ die normierte reduzierte Temperatur und $g_c(0)$ die kritische Kopplung im Limes $m_q \to 0$, a steht für die Gitterkonstante und N_τ für die Ausdehnung des Gitters in Zeitrichtung. Der Magnetisierung des Spinmodells entspricht das sogenannte chirale Kondensat

$$\mathcal{M}^i_j \;=\; \left\langle \bar{q}^i_L\, q_{R_j} \right\rangle \tag{1.32}$$

der QCD im chiralen Limes. Die 2×2-Matrix $\mathcal{M}$ kann durch vier reelle Parameter $(\sigma, \pi_1, \pi_2, \pi_3)$ parametrisiert werden, so daß

$$\mathcal{M} \;=\; \sigma + i\,\boldsymbol{\pi}\,\boldsymbol{\tau}, \tag{1.33}$$

wobei die τ_k die Pauli-Matrizen sind. Der Matrix $\mathcal{M}$ kann damit ein vierkomponentiger Vektor $\boldsymbol{\phi} = (\sigma, \boldsymbol{\pi})$ zugeordnet werden, dessen erste Komponente das σ-Meson und die restlichen Komponenten die Pionen als Goldstone-Teilchen repräsentieren. Der chiralen Transformation $\mathcal{M} \to U^\dagger \mathcal{M} V$ entspricht dann eine einfache O(4)-Rotation des Vektors $\boldsymbol{\phi}$ (vgl. [2]). Es gilt stets $\langle \boldsymbol{\pi} \rangle = 0$, und die Symmetriebrechung ergibt sich durch $\langle \sigma \rangle = 0$ oberhalb und $\langle \sigma \rangle \neq 0$ unterhalb des Übergangspunktes.
In der Nähe des kritischen Punktes können Aussagen über die Massen des σ-Mesons und der Pionen getroffen werden. Dazu muß zunächst definiert werden, was mit dem Begriff der „Masse“ gemeint ist. Die Masse kann als inverse Korrelationslänge oder mit Hilfe der Suszeptibilitäten eingeführt werden. In der Literatur der „Physik der kondensierten Materie“ wird häufig letzteres verwendet. Hierzu definieren wir zunächst die Korrelationsmatrix

$$G_{ij}(\mathbf{x}) \;=\; \left\langle \phi^i(\mathbf{0})\, \phi^j(\mathbf{x}) \right\rangle - \left\langle \phi^i(\mathbf{0}) \right\rangle^2, \tag{1.34}$$

wobei $i, j = 0, 1, 2, 3$ und $\phi^0 = \sigma$ und $\phi^k = \pi_k$ (für $k = 1, 2, 3$). Damit werden dann üblicherweise die Massen der Mesonen über

$$m_\sigma^{-2} \;=\; \int d\mathbf{x}\, G_{00}(\mathbf{x}) \tag{1.35}$$

und

$$m_\pi^{-2}\,\delta_{ij} \;=\; \int d\mathbf{x}\,G_{ij}(\mathbf{x}) \tag{1.36}$$

definiert. Ein Vergleich dieser Korrelationsmatrix mit den in Kapitel 1.2 eingeführten Korrelationsfunktionen $G_L(\mathbf{x})$ und $G_T(\mathbf{x})$ (Gleichungen (1.19) und (1.20)) des O(4)-Spinmodells liefert folgende Entsprechungen

$$m_\sigma^{-2} \;=\; \sum_{\mathbf{x}} G_L(\mathbf{x}) \;=\; \chi_L \tag{1.37}$$

und

$$m_\pi^{-2} \;=\; \sum_{\mathbf{x}} G_T(\mathbf{x}) \;=\; \chi_T. \tag{1.38}$$

Die Integration in den Gleichungen (1.35) und (1.36) wurde hierbei durch die Summation auf dem diskreten Gitter ersetzt.
Bei dieser statistischen Massendefinition stehen also die Massen der Mesonen im direkten Zusammenhang mit den durch Gittersimulationen des O(4)-Modells meßbaren Suszeptibilitäten. Die „wirkliche“ Größe der Massen ist abhängig vom jeweiligen Modell, doch können zumindest universelle Aussagen über das Skalenverhalten der Massen am Übergangspunkt gemacht werden.

Kapitel 2

Kritische Phänomene

2.1 Phasenübergänge

In der Natur treten Phasenübergänge in vielen unterschiedlichen Systemen auf. Bei einem solchen Übergang bewirkt eine kleine Veränderung der äußeren Parameter (wie z.B. der Temperatur) eine große Veränderung der makroskopischen Eigenschaften des physikalischen Systems, so daß man zwischen zwei Phasen unterscheiden kann. Beschrieben wird diese Veränderung durch den Ordnungsparameter, einer makroskopischen Größe, die sich in charakteristischer Weise am Übergangspunkt ändert. In der einen Phase ist der Ordnungsparameter null, während er in der anderen Phase ungleich null ist. Kennzeichnend für einen Phasenübergang ist eine Singularität der ersten oder einer der höheren Ableitungen des entsprechenden thermodynamischen Potentials. In unserem Fall betrachten wir die Ableitung der freien Energie nach dem äußeren Feld. Man unterscheidet im allgemeinen zwischen diskreten, auch Phasenübergänge erster Ordnung genannt, und kontinuierlichen Phasenübergängen.
Bei Phasenübergängen erster Ordnung tritt latente Wärme auf, und die Ableitung der freien Energie nach dem äußeren Parameter ist unstetig. Am kritischen Punkt koexistieren beide Phasen, und die latente Wärme ist die Energie, die beim Übergang von einer in die andere Phase aufgewendet werden muß bzw. frei wird. Die Korrelationslänge hat am kritischen Punkt ein Maximum, doch impliziert die Koexistenz zweier Phasen eine stets endliche Korrelationslänge. Die meisten Übergänge zwischen Gasen und Flüssigkeiten sowie Flüssigkeiten und Festkörpern sind Beispiele für Phasenübergänge erster Ordnung.
Die kontinuierlichen Phasenübergänge sind von zweiter (oder höherer) Ordnung, d. h., sie haben keine Diskontinuität in der ersten Ableitung (bzw. den ersten Ableitungen) der freien Energie. Die Phasen gehen am kritischen Punkt ohne Auftreten einer

latenten Wärme kontinuierlich ineinander über, und die Korrelationslänge divergiert. Beispiele für kontinuierliche Phasenübergänge sind Übergänge zwischen para- und ferromagnetischer oder auch leitender und surpaleitender Phase einiger Festkörper. Die O(N)-Modelle mit mindestens drei Dimensionen haben für verschwindendes äußeres Feld ebenfalls einen Phasenübergang zweiter Ordnung.

2.2 Kritische Exponenten

Es hat sich gezeigt, daß bei einem kontinuierlichen Phasenübergang viele thermodynamische Größen nahe der kritischen Temperatur durch einfache Potenzgesetze beschrieben werden können. Die dabei auftretenden Exponenten, welche für das jeweils betrachtete System charakteristisch sind, nennt man kritische Exponenten.
Im folgenden betrachten wir stets ein positives Feld H und somit den Grenzfall $H \to 0^+$. Für verschwindendes äußeres Feld und $T < T_c$ ergibt sich für die spontane Magnetisierung

$$M(t < 0, H = 0) \; = \; (-t)^{\beta} \, . \tag{2.1}$$

Dabei ist β der charakteristische kritische Exponent und t die mit entsprechender Normierung T_0 reduzierte Temperatur $\left(t = \frac{T - T_c}{T_0} \right)$. Auch für andere Observablen ergeben sich Proportionalitäten mit weiteren kritischen Exponenten. Man erhält im allgemeinen für $H = 0$ z. B.

$$\chi_{L,T} \;\sim\; |t|^{-\gamma} \, , \tag{2.2}$$

$$\xi_{L,T} \;\sim\; |t|^{-\nu} \, , \tag{2.3}$$

$$G_{L,T}(\mathbf{x}) \;\sim\; \frac{1}{|\mathbf{x}|^{d-2+\eta}} , \tag{2.4}$$

wobei aber (2.2) und (2.3) für das O(4)-Modell für $t < 0$ nicht gelten, da aufgrund des Goldstone-Effektes die Suszeptibilitäten und Korrelationslängen auf der Koexistenzlinie divergieren (vgl. Kapitel 1.3). Der kritische Exponent η wird auch als anomale Dimension bezeichnet.
Am kritischen Punkt T_c und $H \gtrsim 0$ ergeben sich weitere Potenzgesetze

$$M \;=\; h^{\frac{1}{\delta}} , \tag{2.5}$$

$$\chi_{L,T} \;\sim\; h^{-\gamma_c} , \tag{2.6}$$

$$\xi_{L,T} \;\sim\; h^{-\nu_c} . \tag{2.7}$$

Dabei ist h das mit H_0 normierte äußere Feld $\left(h = \frac{H}{H_0} \right)$.
Es sind nur zwei der kritischen Exponenten wirklich unabhängig voneinander. Alle

weiteren sind gegeben durch die Skalenrelationen

$$\begin{aligned} d\,\nu &= 2\,\beta + \gamma, \\ \gamma &= \beta\,(\delta - 1), \\ \gamma &= \nu\,(2 - \eta), \\ \nu_c &= \frac{\nu}{\beta\,\delta}, \\ \gamma_c &= 1 - \frac{1}{\delta}. \end{aligned} \tag{2.8}$$

Modelle, die das gleiche Verhalten zeigen, also die gleichen kritischen Exponenten haben, können in einer Universalitätsklasse zusammengefaßt werden. Nach der Universalitätshypothese hängen die kritischen Exponenten einer Universalitätsklasse nur von der Dimension des Systems, der Dimension des Ordnungsparameters und der Symmetrie der Wirkung ab. Die Universalitätshypothese kann mit Hilfe der Renormierungsgruppentheorie bewiesen werden, deren Idee im nächsten Kapitel kurz beschrieben wird.
Neben den Exponenten gibt es auch andere universelle Größen, wie z. B. bestimmte Quotienten aus den Vorfaktoren der Potenzgesetze, die sogenannten Amplitudenverhältnisse.

2.3 Renormierungsgruppentheorie

Im kritischen Bereich des jeweiligen Systems ist die Korrelationslänge wesentlich größer als die Reichweite der mikroskopischen Wechselwirkung, so daß viele unterschiedliche Systeme in der Nähe von T_c universelles Verhalten zeigen. Da die Korrelationslänge zur einzig relevanten Längenskala wird, werden Details der ursprünglich kurzreichweitigen Wechselwirkung nebensächlich. So ist es möglich, unterschiedliche physikalische Modelle mit unterschiedlichen kurzreichweitigen Wechselwirkungen in einer Universalitätsklasse zusammenzufassen.
Eine Methode, nur die langreichweitigen Wechselwirkungen in einem System zu betrachten, läßt sich für Spinsysteme z. B. durch sogenannte Blockspin-Transformationen umsetzen [11]. Die Blockspin-Technik wurde von Kadanoff erfunden und später von Niemeijer und van Leeuwen zur praktisch brauchbaren Methode weiterentwickelt.
Die Transformation besteht aus drei Schritten. Zunächst wird das Gitter systematisch in Blöcke zerlegt, in denen mehrere Spins zu einem zusammengefaßt werden. Dadurch wird der ursprüngliche Gitterabstand a zwischen zwei benachbarten Spins um den Faktor b gestreckt. Den Blöcken weist man jeweils einen Blockspin in beliebiger aber repräsentativer Weise zu. Dies kann z. B. einfach über den Mittelwert aller sich im Block befindenden Spins geschehen. Abschließend reskaliert man das

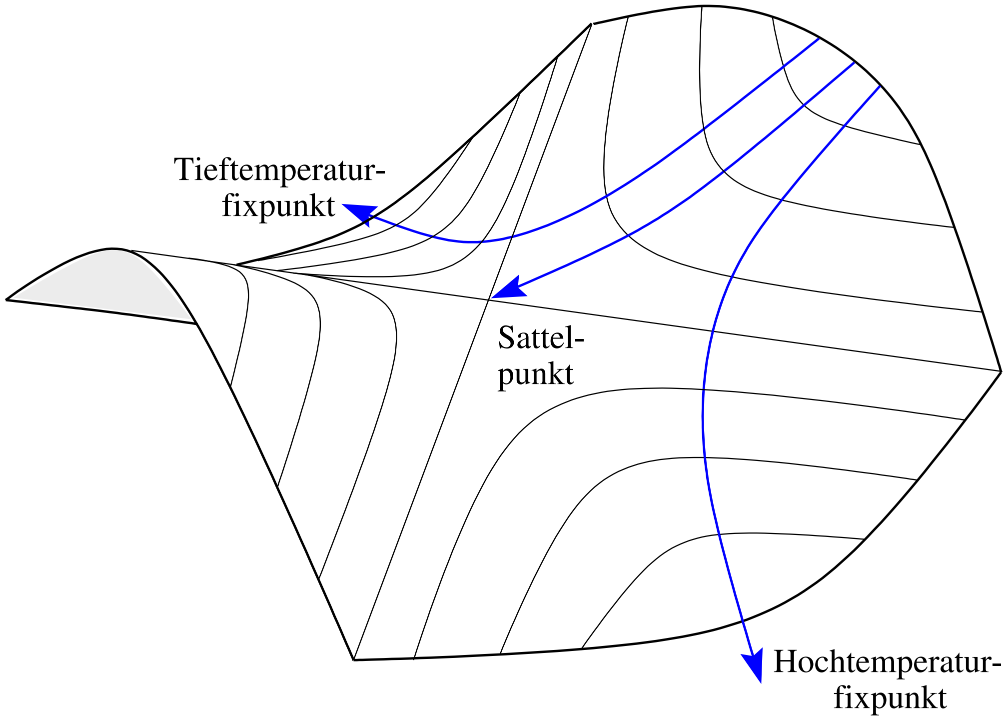


Abbildung 2.1: Sattelförmige Fläche im Kopplungsraum.

Gitter mit dem Faktor b^{-1}, um den ursprünglichen Gitterabstand a (nun zwischen zwei Blockspins) wiederherzustellen.
Durch diese Transformation werden Spinfluktuationen mit einer Ausdehnung kleiner als $a \cdot b$ eleminiert, und statt F Freiheitsgraden pro Block hat das System nur noch $F' = \frac{F}{b^d}$. Auch die Hamiltonfunktion ändert sich durch diese Transformation, da zwischen den Blockspins andere Kopplungen wirken. Wird jeder Kopplung eine Koordinate eines Vektors $\mathbf{K}$ in einem Kopplungsraum zugeordnet, bewirkt die Renormierungsgruppentransformation $\mathcal{R}$ eine Transformation dieses Vektors

$$\mathbf{K}' = \mathcal{R}(\mathbf{K}). \tag{2.9}$$

Die Änderungen der Kopplungen kann man sich leicht veranschaulichen [12]. Jedes Spinsystem und jedes daraus resultierende Blockspinsystem entspricht jeweils einem Punkt im Parameterraum, und die Gesamtheit aller Punkte bildet eine Parameterfläche. Abbildung 2.1 zeigt eine mögliche sattelförmige Hyperfläche. Wiederholt man die Transformationen mehrmals hintereinander, können die Veränderungen, die das Spinsystem dadurch erfährt, durch eine Kurve auf der Hyperfläche dargestellt werden. In Abbildung 2.1 sind drei verschiedene solcher Kurven (blaue Linien) gezeigt. Wie man sieht, hängt der Verlauf der Kurve stark vom Anfangswert ab. In diesem speziellen Fall existieren im Kopplungsraum drei Fixpunkte (mit $\mathbf{K}^*_{Fix} = \mathcal{R}(\mathbf{K}^*_{Fix})$), gegen die das System bei der Renormierung strebt. Da ist zum einen der Hochtemperaturfixpunkt $\mathbf{K}^*_{HT}$ $(T \to \infty)$, zu dem das System läuft, wenn bei $T > T_c$ be-

gonnen wird. Durch die Blockbildung wird jede lokale Ausrichtung zerstört, sobald der Gitterabstand größer als die Korrelationslänge ist, und das System wird mit jeder Transformation immer ungeordneter, d. h., es strebt zu höherer Temperatur. Startet man dagegen bei $T < T_c$, wird das Spinsystem immer geordneter und erreicht irgendwann den Tieftemperaturfixpunkt $\mathbf{K}^*_{TT}$ $(T = 0)$. Für $T = T_c$ ändern die Blockspin-Transformationen nicht die Temperatur, weil dort die Korrelationslänge unendlich ist, und somit Längenskalen keine Rolle spielen. Der Fixpunkt $\mathbf{K}^*$, gegen den das System dann strebt, ist der kritische Punkt des Phasenübergangs, an dem man besonders interessiert ist. $\mathbf{K}^*$ ist der Sattelpunkt der Hyperfläche, der für einige Kopplungen attraktiv, für andere jedoch repulsiv ist.
Die Form der Fläche ist für alle Modelle aus derselben Universalitätsklasse identisch. Aus der Form lassen sich mit Hilfe von Skalenfunktionen die kritischen Exponenten ableiten.

2.4 Universelle Skalenfunktionen

Mit einem linearen Ansatz für das Verhalten nahe $\mathbf{K}^*$ kann man Skalenvariablen u_i definieren, die gemäß

$$u'_i \;=\; \mathcal{R}(u_i) \;=\; \lambda_i\, u_i \tag{2.10}$$

transformieren [11]. Es ist üblich, die vom Reskalierungsfaktor b unabhängigen Eigenwerte y_i der Renormierungsgruppe zu verwenden, die über die Beziehung

$$\lambda_i \;=\; b^{y_i} \tag{2.11}$$

mit den Eigenwerten λ_i in Verbindung stehen. Die Skalenvariablen werden unterteilt in

- relevante Skalenvariablen, die vom Fixpunkt wegführen $(y_i > 0)$,
- irrelevante Skalenvariablen, die zum Fixpunkt hinführen $(y_i < 0)$ und
- marginale Skalenvariablen, bei denen mit einem linearen Ansatz keine Aussage über die Flußrichtung gemacht werden kann $(y_i = 0)$.

Die kritischen Exponenten erhält man durch Ableiten der freien Energie. Da die Zustandssumme unter Renormierungsgruppentransformationen invariant ist, kann die freie Energiedichte in einen regulären und einen singulären Anteil zerlegt werden. Für die Abhängigkeit der freien Energiedichte von den Kopplungen ergibt sich somit

$$\mathcal{F}(\{\mathbf{K}\}) \;=\; \mathcal{F}_r(\{\mathbf{K}\}) + b^{-d}\,\mathcal{F}_s(\{\mathbf{K}'\}). \tag{2.12}$$

Der reguläre Anteil $\mathcal{F}_r$ beschreibt nur die kurzreichweitigen Wechselwirkungen innerhalb der Blöcke, so daß für das kritische Verhalten also nur der singuläre Anteil $\mathcal{F}_s$ verantwortlich ist. Dieser Teil transformiert mit den Skalenvariablen nach

$$\mathcal{F}_s(\{u_i\}) \;=\; b^{-d}\, \mathcal{F}_s(\{b^{y_i}\, u_i\}). \tag{2.13}$$

Bei den hier betrachteten O(N)-Modellen gibt es nur zwei relevante Skalenvariablen, die thermische u_t für die reduzierte Temperatur $\bar{t} = \frac{T-T_c}{T_c}$ und die magnetische u_h für das äußere Feld. Wird für diese jeweils nahe dem kritischen Punkt ($\bar{t} = H = 0$) ein linearer Ansatz [11] gemacht, der dort das Verschwinden der Skalenvariablen gewährleistet,

$$u_t \;=\; c_{\bar{t}}\, \bar{t} \qquad \text{und} \qquad u_h \;=\; c_H\, H \tag{2.14}$$

mit $c_{\bar{t}}$ und c_H als positive Konstanten, so wird (2.13) jetzt

$$\mathcal{F}_s(\bar{t}, H) \;=\; b^{-d}\, \mathcal{F}_s\left(b^{y_t}\, c_{\bar{t}}\, \bar{t}\,,\, b^{y_h}\, c_H\, H\right). \tag{2.15}$$

Mit der speziellen Wahl

$$b \;=\; |u_t|^{-\frac{1}{y_t}} \;=\; |c_{\bar{t}}\, \bar{t}|^{-\frac{1}{y_t}}\,, \tag{2.16}$$

folgt

$$\mathcal{F}_s(\bar{t}, H) \;=\; |c_{\bar{t}}\, \bar{t}|^{\frac{d}{y_t}}\; \Phi_{\pm}\left(|c_{\bar{t}}\, \bar{t}|^{-\frac{y_h}{y_t}}\; c_H\, H\right), \tag{2.17}$$

wobei Φ_+ und Φ_- universelle Skalenfunktionen für $\bar{t} > 0$ bzw. $\bar{t} < 0$ sind.
Damit ergibt sich die Magnetisierung

$$\begin{aligned} M \;&=\; -\frac{\partial \mathcal{F}_s}{\partial H} \\ &=\; -\,|c_{\bar{t}}\, \bar{t}|^{\frac{d-y_h}{y_t}}\; c_H\, \Phi'_{\pm}\left(|c_{\bar{t}}\, \bar{t}|^{-\frac{y_h}{y_t}}\; c_H\, H\right). \end{aligned} \tag{2.18}$$

Um zu demonstrieren, wie man hiermit die kritischen Exponenten erhält, folgt die Berechnung von β über die spontane Magnetisierung im Grenzfall $H \to 0^+$ bei $\bar{t} < 0$

$$\begin{aligned} M(\bar{t} < 0, H = 0) \;&=\; -\,|c_{\bar{t}}\, \bar{t}|^{\frac{d-y_h}{y_t}}\; c_H\, \Phi'_-(0) \\ &=\; (-t)^{\beta}\,. \end{aligned} \tag{2.19}$$

Der Exponent $\frac{d-y_h}{y_t}$ wird als kritischer Exponent β definiert, und t ist die mit geeignetem T_0 normierte reduzierte Temperatur

$$t \;=\; \frac{T - T_c}{T_0} \tag{2.20}$$

mit

$$T_0 \;=\; \frac{T_c}{c_{\bar{t}}\, \left(-c_H\, \Phi'_-(0)\right)^{\frac{1}{\beta}}}. \tag{2.21}$$

Durch analoges Vorgehen für die anderen thermodynamischen Größen erhält man weitere kritischen Exponenten. Durch Berechnung der Magnetisierung bei $t = 0$ und $H \neq 0$, kann auch das äußere Feld H geeignet mit einem H_0 normiert werden. In folgenden Rechnungen wird das reduzierte Feld

$$h \;=\; \frac{H}{H_0} \tag{2.22}$$

verwendet.
Im Gegensatz zum singulären Anteil der freien Energiedichte transformiert die Korrelationslänge unter Blockspin-Transformationen gemäß

$$\xi(\{u_i\}) \;=\; b\,\xi(\{b^{y_i}\,u_i\}). \tag{2.23}$$

Mit einem linearen Ansatz für die relevanten Skalenvariablen (nun mit den bereits passend normierten Größen t und h)

$$u_t \;=\; c_t\,t \qquad \text{und} \qquad u_h \;=\; c_h\,h \tag{2.24}$$

und der Wahl

$$b \;=\; |u_t|^{-\frac{1}{y_t}} \;=\; |c_t\,t|^{-\frac{1}{y_t}} \tag{2.25}$$

erhält man

$$\xi(t,h) \;=\; |c_t\,t|^{-\frac{1}{y_t}}\;\Psi_{1\pm}\left(c_h\,c_t^{-\frac{y_h}{y_t}}\;h\;|t|^{-\frac{y_h}{y_t}}\right). \tag{2.26}$$

Wählt man dagegen

$$b \;=\; u_h^{-\frac{1}{y_h}} \;=\; (c_h\,h)^{-\frac{1}{y_h}}\,, \tag{2.27}$$

(die Betragstriche sind hier unnötig, da h stets positiv ist,) ergibt sich für die Korrelationslänge die etwas andere Form

$$\xi(t,h) \;=\; (c_h\,h)^{-\frac{1}{y_h}}\;\Psi_2\left(c_t\,c_h^{-\frac{y_t}{y_h}}\;t\,h^{-\frac{y_t}{y_h}}\right) \tag{2.28}$$

mit einer Skalenfunktion Ψ_2.
Durch Vergleich mit den Potenzgesetzen aus Kapitel 2.2 lassen sich alle kritischen Exponenten und deren Zusammenhang über die Skalenrelationen (2.8) aus den beiden voneinander unabhängigen Exponenten

$$y_t \;=\; \frac{1}{\nu} \qquad \text{und} \qquad y_h \;=\; \frac{1}{\nu_c} \tag{2.29}$$

ableiten.
Bisher wurden nur die relevanten Skalenvariablen berücksichtigt. Alle hier hergeleiteten Zusammenhänge gelten nur für die Grenzfälle $t \to 0$ und $h \to 0$. Bei Entfernung vom kritischen Punkt müssen eventuell noch analytische und nicht-analytische

Korrekturen, sogenannte *Corrections to Scaling*, mit einbezogen werden. Die analytischen kommen dadurch zustande, daß die linearen Approximationen (2.14) bzw. (2.24) der relevanten Skalenvariablen u_t und u_h in der Nähe des kritischen Punktes nicht exakt gültig sind. Je weiter man sich vom kritischen Punkt entfernt, desto größer werden die analytischen Korrekturen. Mehr ins Gewicht fallen allerdings die nicht-analytischen Korrekturen, für die bei vielen Modellen auch die ersten irrelevanten Skalenvariablen mit einbezogen werden müssen. Bei Berücksichtigung der ersten irrelevanten Skalenvariablen u_3 in der Transformationsgleichung (2.13) für die freie Energiedichte folgt beispielsweise

$$\mathcal{F}_s(u_t, u_h, u_3) \;=\; b^{-d}\,\mathcal{F}_s\left(b^{y_t}\,c_t\,t\,,\; b^{y_h}\,c_h\,h\,,\; b^{y_3}\,u_3\right). \tag{2.30}$$

Für die Magnetisierung erhält man bei Berücksichtigung des ersten nicht-analytischen (Exponent $y_3 = -\omega$) und eines ersten analytischen Korrekturterms (vgl. [5])

$$M \;=\; (-t)^{\beta}\,\left(1 + b_1\,(-t)^{\omega\nu} + b_2\,(-t)\right). \tag{2.31}$$

Im Falle des in dieser Arbeit betrachteten O(4)-Modells sind die *Corrections to Scaling* für die Magnetisierung in der Nähe des kritischen Punktes allerdings im Rahmen unserer gewünschten Genauigkeit so gering, daß sie nicht berücksichtigt werden müssen.

2.5 Finite Size Scaling

Alle bisher gefundenen Zusammenhänge gelten für den Grenzfall unendlichen Volumens. Bei Computersimulationen ist man aber gezwungen, die Gitterausdehnung ($V = L^d$) auf einen endlichen Wert zu begrenzen. So kann z. B. die Korrelationslänge am kritischen Punkt nicht divergieren, sondern nur maximal den Wert L, d. h. die Ausdehnung des Gitters in einer Raumrichtung, annehmen. Mit der Renormierungsgruppentheorie kann jedoch auch die Volumenabhängigkeit des Systems beschrieben und auf den Grenzfall unendlichen Volumens geschlossen werden. Eine Renormierungsgruppentransformation $\mathcal{R}$ reskaliert das System mit dem Faktor b. Dies gilt selbstverständlich auch für die Größe L, die durch die Transformation zu L/b wird. Die Idee des *Finite Size Scaling* ist, die inverse Systemlänge L^{-1} auf eine Stufe mit den relevanten Skalenvariablen zu stellen [11]. Konstruieren wir uns also zunächst eine dimensionslose Skalenvariable

$$u_L \;=\; \frac{l_0}{L} \tag{2.32}$$

mit einer beliebigen, systemunabhängigen Referenzlänge l_0. Betrachten wir die Transformation der neuen relevanten Skalenvariablen

$$\mathcal{R}(u_L) \;=\; b^{y_L}\,u_L \tag{2.33}$$

mit dem Eigenwert $y_L = 1$ und beziehen u_L auch in den singulären Anteil der freien Energiedichte mit ein, so transformiert diese gemäß

$$\mathcal{F}_s(u_t, u_h, u_L) \;=\; b^{-d}\, \mathcal{F}_s\, (b^{y_t}\, u_t\, ,\, b^{y_h}\, u_h\, ,\, b\, u_L)\, . \tag{2.34}$$

Mit der speziellen Wahl

$$b \;=\; {u_L}^{-1} \;=\; \frac{L}{l_0} \tag{2.35}$$

und dem Ansatz (2.24) für u_t und u_h erhält man

$$\mathcal{F}_s\, (t, h, L) \;=\; L^{-d}\, Q\, (t\, L^{y_t}\, ,\, h\, L^{y_h}) \tag{2.36}$$

mit einer Skalenfunktion Q. Ein- bzw. zweimaliges Ableiten von $\mathcal{F}_s$ nach H liefert die Finite-Size-Skalenfunktionen für die Magnetisierung und die Suszeptibilität

$$M\, (t, h, L) \;=\; L^{-d+y_h}\, Q_M\, (t\, L^{y_t}\, ,\, h\, L^{y_h}) \tag{2.37}$$
$$\chi\, (t, h, L) \;=\; L^{-d+2y_h}\, Q_\chi\, (t\, L^{y_t}\, ,\, h\, L^{y_h})\, . \tag{2.38}$$

Die gleiche Überlegung läßt sich auch für die Korrelationslänge anstellen. Diese transformiert gemäß

$$\xi\, (u_t, u_h, u_L) \;=\; b\, \xi\, (b^{y_t}\, u_t\, ,\, b^{y_h}\, u_h\, ,\, b\, u_L)\, , \tag{2.39}$$

so daß sich mit (2.35)

$$\xi\, (t, h, L) \;=\; L\, Q_\xi\, (t\, L^{y_t}\, ,\, h\, L^{y_h}) \tag{2.40}$$

ergibt.

Kapitel 3

Die Korrelationslängen

3.1 Verschiedene Methoden zur Bestimmung der Korrelationslängen

In Kapitel 1.2 wurde bereits die Zweipunkt-Korrelationsfunktion $G(\mathbf{x})$, welche die Korrelation zwischen zwei Spins auf unterschiedlichen Gitterplätzen beschreibt, eingeführt. Längs einer Raumrichtung fällt $G(\mathbf{x})$ exponentiell mit dem Abstand x der Spins ab

$$G(\mathbf{x}) \underset{x\to\infty}{\sim} e^{-x/\xi^{exp}}. \tag{3.1}$$

ξ^{exp} ist dabei die exponentielle Korrelationslänge, deren Verhalten in dieser Arbeit hauptsächlich untersucht wird. Die Proportionalität (3.1) gilt für den Grenzfall unendlichen Volumens. Das langreichweitige Verhalten der Korrelationsfunktion macht daher ξ^{exp} in einem stets endlichen Gittervolumen zu einer schwer zu bestimmenden Größe, wenn $\xi^{exp} \sim L$. Gerade in der Nähe von T_c ist die Korrelationslänge groß, weshalb hier auch sehr große Gitter benötigt werden. Zusätzlich hat man die Schwierigkeit, daß auch höhere Zustände mit kleineren Korrelationslängen ($\xi_i < \xi^{exp}$) beitragen können. Dies ist in sofern problematisch, da der ursprüngliche Ansatz (3.1) keine gute Schätzung der exponentiellen Korrelationlänge mehr liefert, sollten diese Beiträge wesentlich von null verschieden sein.
Es gibt mehrere Verfahren, ξ^{exp} zu bestimmen bzw. zu schätzen. Im Folgenden werden drei verschiedene Methoden vorgestellt und verglichen.

3.1.1 Das Fourier-Verfahren

Ein allgemein übliches Verfahren, die exponentielle Korrelationslänge zu schätzen, ist die Definition einer Korrelationslänge mit Hilfe der Fouriertransformierten F der Korrelationsfunktion bei dem kleinsten nichtverschwindenden Impuls $\mathbf{p} = (p_1, ..., p_d)$ [13], d. h.

$$F \;=\; \widetilde{G}(\mathbf{p})|_{|\mathbf{p}|=2\pi/L}. \tag{3.2}$$

Die Fouriertransformierte der Korrelationsfunktion (1.18) ist auf dem Gitter definiert durch

$$\begin{aligned} \widetilde{G}(\mathbf{p}) &= \sum_{\mathbf{x}} e^{i\mathbf{px}}\, G(\mathbf{x}) \\ &= \sum_{\mathbf{x}} e^{i\mathbf{px}}\, \langle \mathbf{s_0}\, \mathbf{s_x} \rangle - \sum_{\mathbf{x}} e^{i\mathbf{px}}\, \langle \mathbf{s} \rangle^2 . \end{aligned} \tag{3.3}$$

Der zweite Term verschwindet für $\mathbf{p} \neq \mathbf{0}$, da $\langle \mathbf{s} \rangle$ unabhängig von $\mathbf{x}$ ist. Der erste Term läßt sich umformen, so daß

$$\begin{aligned} \widetilde{G}(\mathbf{p}) &= \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{x}} \sum_{\mathbf{y}} e^{i\mathbf{px}}\, \langle \mathbf{s_y}\, \mathbf{s_{y+x}} \rangle \\ &= \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{x}} \sum_{\mathbf{y}} e^{i\mathbf{p(x-y)}}\, \langle \mathbf{s_x}\, \mathbf{s_y} \rangle \\ &= \frac{1}{V} \left\langle \left(\sum_{\mathbf{x}} e^{i\mathbf{px}}\, \mathbf{s_x} \right) \left(\sum_{\mathbf{y}} e^{-i\mathbf{py}}\, \mathbf{s_y} \right) \right\rangle \\ &= \frac{1}{V} \left\langle \left| \sum_{\mathbf{x}} e^{i\mathbf{px}}\, \mathbf{s_x} \right|^2 \right\rangle \end{aligned} \tag{3.4}$$

für $\mathbf{p} \neq \mathbf{0}$. Bei dieser Rechnung wurde die Periodizität des Gitters ausgenutzt.
Für die Fouriertransformierte F gilt demnach

$$F \;=\; \frac{1}{V} \left. \left\langle \left| \sum_{\mathbf{x}} e^{i\mathbf{px}}\, \mathbf{s_x} \right|^2 \right\rangle \right|_{|\mathbf{p}|=2\pi/L} . \tag{3.5}$$

Auf dem dreidimensionalen Gitter gibt es genau drei kleinste Impulse, nämlich jeweils entlang einer Raumrichtung

$$\mathbf{p}^{(\mu)} \;=\; \frac{2\pi}{L}\, \mathbf{e}_\mu \qquad \text{mit} \qquad \mu \;=\; x, y, z. \tag{3.6}$$

So kann pro Raumrichtung μ ein $F^{(\mu)}$ durch

$$F^{(\mu)} \;=\; \widetilde{G}(\mathbf{p}^{(\mu)}) \;=\; \frac{1}{V} \left\langle \left| \sum_{j_\mu} e^{i2\pi j_\mu/L}\, \hat{\mathbf{S}}_{j_\mu} \right|^2 \right\rangle , \tag{3.7}$$

wobei $j_\mu = 1, ..., L$ und $\hat{\mathbf{S}}_{j_\mu}$ jeweils für die Summe aller Spins auf einer Ebene senkrecht zu $\mathbf{e}_\mu$ steht, konstruiert werden.
Dieselbe Berechnung läßt sich auch mit der longitudinalen und der transversalen Korrelationsfunktion separat durchführen. Es ergeben sich dann pro Raumrichtung μ die longitudinale Fouriertransformierte

$$F_L^{(\mu)} \;=\; \widetilde{G}_L(\mathbf{p}^{(\mu)}) \;=\; \frac{1}{V} \left\langle \left| \sum_{j_\mu} e^{i2\pi j_\mu/L}\, \hat{S}^{\|}_{j_\mu} \right|^2 \right\rangle \tag{3.8}$$

und die transversale

$$F_T^{(\mu)} \;=\; \widetilde{G}_T(\mathbf{p}^{(\mu)}) \;=\; \frac{1}{V\,(N-1)} \left\langle \left| \sum_{j_\mu} e^{i2\pi j_\mu/L}\, \hat{\mathbf{S}}^{\perp}_{j_\mu} \right|^2 \right\rangle . \tag{3.9}$$

Das Mittel über diese drei so berechneten $F^{(\mu)}_{L,T}$ liefert eine verbesserte Schätzung der Fouriertransformierten

$$F_{L,T} \;=\; \frac{1}{3} \sum_{\mu} F^{(\mu)}_{L,T}. \tag{3.10}$$

Damit können nun die Korrelationslängen ξ_L^F und ξ_T^F über

$$\xi_L^F \;=\; \left(\frac{\chi_L/F_L - 1}{4\,\sin^2(\pi/L)} \right)^{\frac{1}{2}} \tag{3.11}$$

und

$$\xi_T^F \;=\; \left(\frac{\chi_T/F_T - 1}{4\,\sin^2(\pi/L)} \right)^{\frac{1}{2}} \tag{3.12}$$

definiert werden. (Allgemein übliche Bezeichnungen hierfür sind eigentlich ξ_L^{2nd} und ξ_T^{2nd}, doch dient uns der Index F zur Unterscheidung von Korrelationslängen, die über ein anderes Verfahren bestimmt werden.)
Die Definitionen (3.11) und (3.12) lassen sich durch einen Ansatz aus der freien skalaren Feldtheorie motivieren. Wird für die Korrelationsfunktionen im Impulsraum der Ansatz

$$\widetilde{G}_{L,T}(\mathbf{p}) \;=\; \frac{Z_{L,T}}{\xi_{L,T}^{-2} + 4\sum_{k=1}^{d} \sin^2\left(\frac{p_k}{2}\right)} \tag{3.13}$$

für ein freies Feld gemacht, wobei die Impulskomponente p_k im Kontinuum durch $2\sin\left(\frac{p_k}{2}\right)$ auf dem Gitter ersetzt wurde, so folgt wegen (1.21) für $\mathbf{p} = \mathbf{0}$

$$\widetilde{G}_{L,T}(\mathbf{0}) \;=\; \chi_{L,T} \;=\; Z_{L,T}\, \xi^2_{L,T}. \tag{3.14}$$

Für $\mathbf{p}^{(\mu)}$ aus Gleichung (3.6) ergibt sich

$$\widetilde{G}_{L,T}(\mathbf{p}^{(\mu)}) \;=\; F_{L,T} \;=\; \frac{Z_{L,T}}{\xi_{L,T}^{-2} + 4\,\sin^2\left(\frac{\pi}{L}\right)}. \tag{3.15}$$

Einsetzen der beiden letzten Gleichungen ineinander liefert dann die Definitionen (3.11) und (3.12) durch eine einfache Rechnung

$$F_{L,T} = \frac{\xi_{L,T}^{-2}\,\chi_{L,T}}{\xi_{L,T}^{-2} + 4\,\sin^2\left(\frac{\pi}{L}\right)}$$

$$\Leftrightarrow\ \xi_{L,T}^{2}\,4\,\sin^2\left(\frac{\pi}{L}\right) = \frac{\chi_{L,T}}{F_{L,T}} - 1. \tag{3.16}$$

3.1.2 Das 2nd-Moment-Verfahren

Eine weitere Möglichkeit, die Korrelationslänge zu schätzen, ist die Berechnung der 2nd-Moment-Korrelationslänge. Diese ist definiert über das zweite und das nullte Moment (μ_2 und μ_0) der Korrelationsfunktion

$$\xi^{2nd} = \left(\frac{\mu_2}{2\,d\,\mu_0}\right)^{\frac{1}{2}} \tag{3.17}$$

mit

$$\mu_2 = \sum_{\mathbf{x}} \mathbf{x}^2\,G(\mathbf{x}) \qquad \text{und} \qquad \mu_0 = \sum_{\mathbf{x}} G(\mathbf{x}). \tag{3.18}$$

μ_0 ist identisch mit der Suszeptibilität χ, wie ein Vergleich mit (1.22) zeigt, μ_2 dagegen ist etwas aufwendiger zu berechnen.
In dieser Arbeit wird μ_2 mit Hilfe von einer Zweiebenen- anstatt einer Zweipunkt-Korrelationsfunktion (wie z. B. auch in [14]) berechnet. Zunächst wird das dreidimensionale kubische Gittervolumen mit einem Koordinatensystem beschrieben, in dem der Gitterplatz i die Koordinaten (x, y, z) (mit $x, y, z = 1, ..., L$) erhält. Dann kann man allen Spins, die sich auf einer Ebene senkrecht zu einer Raumrichtung befinden, einen gemeinsamen mittleren Ebenenspin $\mathbf{S}$ zuordnen. Für beispielsweise $\mathbf{e}_z$ als Normalenrichtung ergeben sich

$$\mathbf{S}_z = \frac{1}{L^2}\sum_x\sum_y \mathbf{s}_{x,y,z} \tag{3.19}$$

als mittlere Ebenenspins. Der Mittelwert dieser $\mathbf{S}_z$ ist gleich dem Gittermittel (1.10) über alle einzelnen Spins

$$\mathbf{S} = \frac{1}{L}\sum_z \mathbf{S}_z = \mathbf{s}, \tag{3.20}$$

und aufgrund der Translationsinvarianz auf dem Gitter ist der Erwartungswert eines Ebenenspins unabhängig vom Ort, so daß gilt

$$\langle \mathbf{S}_z \rangle = \langle \mathbf{S} \rangle = \langle \mathbf{s} \rangle = M. \tag{3.21}$$

Analog zur Zweipunkt-Korrelationsfunktion (1.18) kann damit eine Zweiebenen-Korrelationsfunktion

$$\bar{G}(z) \;=\; L^2 \, \left(\langle \mathbf{S}_0 \, \mathbf{S}_z \rangle - \langle \mathbf{S} \rangle^2\right) \tag{3.22}$$

definiert werden. Dabei steht $\langle \mathbf{S}_0 \, \mathbf{S}_z \rangle$ für den Erwartungswert des Produktes zweier Ebenenspins mit Normalenrichtung $\mathbf{e}_z$ im Abstand z voneinander, und $\langle \mathbf{S} \rangle$ ist wegen (3.21) identisch mit der Magnetisierung des Gesamtsystems. Der Faktor L^2 ist notwendig, damit auch für diese neue Korrelationsfunktion gilt

$$\begin{aligned}
\chi \;=\; \sum_{x,y,z} G(x,y,z) \;&=\; \sum_z \bar{G}(z) \\
&=\; \sum_z L^2 \, \left(\langle \mathbf{S}_0 \, \mathbf{S}_z \rangle - \langle \mathbf{S} \rangle^2\right) \\
&=\; L^2 \left(L \left\langle \mathbf{S} \, \frac{1}{L} \sum_z \mathbf{S}_z \right\rangle - \sum_z \langle \mathbf{S} \rangle^2 \right) \\
&=\; L^3 \, \left(\left\langle \mathbf{S}^2 \right\rangle - \langle \mathbf{S} \rangle^2\right) \\
&=\; V \, \left(\left\langle \mathbf{s}^2 \right\rangle - \langle \mathbf{s} \rangle^2\right) .
\end{aligned} \tag{3.23}$$

Diese Rechnungen lassen sich für die beiden anderen Normalenrichtungen $\mathbf{e}_x$ und $\mathbf{e}_y$ analog durchführen. Bei der tatsächlichen Messung der Zweiebenen-Korrelationsfunktion betrachten wir das Mittel über die drei Raumrichtungen

$$\bar{G}(\tau) \;=\; \frac{1}{3} \, \left(\bar{G}(x) + \bar{G}(y) + \bar{G}(z)\right)\Big|_{\tau = x = y = z} \tag{3.24}$$

für die Abstände $\tau = 0, ..., \frac{L}{2}$.

Bei Berücksichtigung der periodischen Randbedingungen des endlichen Gitters kann das zweite Moment der Korrelationsfunktion mit der Beziehung

$$\mu_2 \;=\; \left[2 \sum_{\tau=1}^{\frac{L}{2}-1} \tau^2 \, \left(\langle \mathbf{S}_0 \, \mathbf{S}_\tau \rangle - \langle \mathbf{S} \rangle^2\right) + \left(\frac{L}{2}\right)^2 \, \left(\left\langle \mathbf{S}_0 \, \mathbf{S}_{\frac{L}{2}} \right\rangle - \langle \mathbf{S} \rangle^2\right) \right] d \, L^2 \tag{3.25}$$

berechnet werden (vgl. [5]).

Diese Berechnung kann auch wieder einzeln für den londitudinalen und den transversalen Anteil der Spins durchgeführt werden. Mit

$$\bar{G}_L(\tau) \;=\; L^2 \, \left(\left\langle S_0^{\|} \, S_\tau^{\|} \right\rangle - M^2\right) \tag{3.26}$$

und

$$\bar{G}_T(\tau) \;=\; \frac{L^2}{(N-1)} \, \left\langle \mathbf{S}_0^{\perp} \, \mathbf{S}_\tau^{\perp} \right\rangle , \tag{3.27}$$

wobei

$$S_z^{\|} \;=\; \frac{1}{L^2} \sum_x \sum_y s_{x,y,z}^{\|} \tag{3.28}$$

und

$$\mathbf{S}_z^{\perp} \;=\; \frac{1}{L^2}\sum_x\sum_y \mathbf{s}_{x,y,z}^{\perp} \tag{3.29}$$

(und analog für die beiden anderen Normalenrichtungen), erhält man ξ_L^{2nd} und ξ_T^{2nd} als Schätzungen der Korrelationslängen.

3.1.3 Das Fit-Verfahren

Die Korrelationslängen lassen sich auch noch durch ein drittes Verfahren schätzen, das in diesem Abschnitt nun kurz beschrieben werden soll. Mit den oben eingeführten Ebenenspins wird zunächst die Zweiebenen-Korrelationsfunktion an den diskreten Stellen $\tau = 1, 2, ..., \frac{L}{2}$ berechnet. Unter Verwendung des naiven Ansatzes (3.1) können diese $\frac{L}{2}$ Werte einfach mit der Funktion

$$\bar{G}(\tau) \;=\; c\, e^{-\frac{\tau}{\xi^{Fit}}} \tag{3.30}$$

gefittet werden, wobei c und ξ^{Fit} freie Parameter sind. Auf dem endlichen Gitter sollten jedoch die periodischen Randbedingungen berücksichtigt werden. Dazu verwendet man für den Fit die Funktion

$$\bar{G}(\tau) \;=\; c\left(e^{-\frac{\tau}{\xi^{Fit}}} + e^{-\frac{(L-\tau)}{\xi^{Fit}}}\right). \tag{3.31}$$

Auch diese Methode läßt sich separat für $\bar{G}_L(\tau)$ und $\bar{G}_T(\tau)$ anwenden, so daß das Fit-Verfahren die Werte ξ_L^{Fit} und ξ_T^{Fit} liefert.

3.2 Theoretische Vorhersagen zu den Korrelationslängen

Die Zustandsgleichung (2.18) kann auch durch die üblicherweise verwendete Widom-Griffiths-Form mit dem Variablen

$$x \;=\; t\,M^{-\frac{1}{\beta}} \tag{3.32}$$

und

$$y \;=\; h\,M^{-\delta} \tag{3.33}$$

als

$$y \;=\; f(x) \tag{3.34}$$

ausgedrückt werden. Mit geeigneten Normierungen T_0 und H_0 ergibt sich die universelle Funktion $f(x)$ mit den Normierungen $f(0) = 1$ und $f(-1) = 0$.
Für die QCD im chiralen Limes mit $N_f = 2$ kann mit der Zustandsgleichung (3.34) das Verhalten der Mesonen-Massen (Gleichungen (1.37) und (1.38)) (vgl. auch [2])

$$m_\sigma^2 \;=\; \chi_L^{-1} \;=\; \frac{\partial H}{\partial M} \tag{3.35}$$

und

$$m_\pi^2 \;=\; \chi_T^{-1} \;=\; \frac{H}{M} \tag{3.36}$$

umgeschrieben werden zu

$$m_\pi^2 \;=\; H_0\,M^{\delta-1}\,f(x) \tag{3.37}$$

und

$$m_\sigma^2 \;=\; H_0\,M^{\delta-1}\left(\delta\,f(x) - \frac{x}{\beta}\,f'(x)\right). \tag{3.38}$$

Betrachten wir nun zwei Limiten etwas genauer. Im Grenzfall $x \to \infty$, der dem Limes $H \to 0$ für $t > 0$ entspricht, sollte sich die volle O(4)-Symmetrie gleichbedeutend mit $m_\sigma = m_\pi$ ergeben. Die Funktion $f(x)$ verhält sich für $x \to \infty$ aufgrund der Analytizitätsbedingungen an die Zustandsgleichung wie $f(x) = cx^\gamma$ [15]. Setzt man dies in die Gleichungen (3.37) und (3.38) ein, ergibt sich mit (3.32), (3.33) und Verwendung der Skalenrelationen (2.8)

$$m_\sigma^2 \;=\; m_\pi^2 \;=\; c\,t^\gamma \qquad \text{für } x \to \infty. \tag{3.39}$$

Im Grenzfall $x \to -1$ nähern wir uns der Koexistenzlinie ($t < 0, H \to 0$). In diesem Limes geht die Magnetisierung gegen einen von null verschiedenen Wert, der spontanen Magnetisierung, und aus (3.36) folgt direkt

$$m_\pi^2 \;\sim\; H. \tag{3.40}$$

Das Verhalten der Masse des σ-Mesons läßt sich mit Hilfe der ϵ-Entwicklung vorhersagen. Hierzu betrachtet man die Dimension d des Systems als kontinuierliche Variable und macht eine Reihenentwicklung der relevanten Größen des Systems in $\epsilon = 4 - d$. Brezin, Wallace und Wilson haben $f(x)$ bis zur Ordnung ϵ^2 mit Hilfe der ϵ-Entwicklung berechnet [16]. Damit und unter Verwendung der Ergebnisse aus [17] läßt sich die Vorhersage $m_\sigma^2 \sim H^{\epsilon/2}$ machen [2]. In unserem Fall betrachten wir ein System in drei Dimensionen, d. h. $\epsilon = 4 - d = 1$, so daß

$$m_\sigma^2 \;\sim\; H^{\frac{1}{2}} \tag{3.41}$$

gelten sollte. Diese theoretischen Vorhersagen stimmen mit numerischen Resultaten für das Verhalten der Suszeptibilitäten in der Nähe der Koexistenzlinie des dreidimensionalen O(4)-Spinmodells

$$\chi_L \;\sim\; H^{-\frac{1}{2}} \qquad \text{und} \qquad \chi_T \;\sim\; H^{-1} \tag{3.42}$$

überein (vgl. z. B. [3]).

Mit diesen Ergebnissen lassen sich nun Vermutungen anstellen, wie die Korrelationslängen in der gebrochenen Phase vom äußeren Feld abhängen. Die oben eingeführte Korrelationsfunktion (3.1) entspricht einem Propagator, der exponentiell mit einer Masse m abfällt. Somit läßt sich direkt die Beziehung $m \sim 1/\xi$ aufstellen. Da das σ-Teilchen der longitudinalen Komponente und die Pionen den transversalen Komponenten des vierdimensionalen Vektors $\boldsymbol{\phi}$ entsprechen, liegt die Identifikation der Mesonenmassen mit den Korrelationslängen gemäß

$$m_\sigma \;\sim\; \frac{1}{\xi_L} \qquad \text{und} \qquad m_\pi \;\sim\; \frac{1}{\xi_T} \tag{3.43}$$

nahe. Damit ergäbe sich dann das Verhalten der Korrelationslängen des O(4)-Spinmodells

$$\xi_L \;\sim\; H^{-\frac{1}{4}} \qquad \text{und} \qquad \xi_T \;\sim\; H^{-\frac{1}{2}} \tag{3.44}$$

bei Annäherung an die Koexistenzlinie.

Fisher und Privman haben in [18] eine Spinwellen-Analyse für $H \to 0$ durchgeführt und bestätigen das Verhalten der transversalen Korrelationslänge $\xi_T \sim H^{-1/2}$ (Gleichung (3.6) in [18]) unter Verwendung der Proportionalität $\xi_T^2 \sim \chi_T$. Sie schließen dagegen aber gleichzeitig eine Identifikation von ξ_L^2 mit χ_L aus. Das Verhalten $\xi_L \sim H^{-1/4}$ für die longitudinale Korrelationslänge würde demnach für kleine Felder nicht gelten.

Stattdessen läßt sich noch eine weitere Vorhersage über den Zusammenhang von ξ_L und ξ_T in der gebrochenen Phase bei kleinem äußeren Feld machen. In [19] untersuchen Patashinskii und Pokrovskii die hydrodynamische Instabilität eines physikalischen Systems mit einem Ordnungsparameter $\boldsymbol{\psi}$, das invariant unter Rotationen von $\boldsymbol{\psi}$ ist. In unserem Fall spielt der vierkomponentige Spin $\mathbf{s}$ die Rolle von $\boldsymbol{\psi}$.

Bei einer infinitesimalen Änderung von $\mathbf{s}$ ändert sich nur die Richtung, nicht aber die Länge des Vektors. Mit $\langle \mathbf{s} \rangle = \left\langle s^{||} \right\rangle = M$ gilt demnach

$$\begin{aligned} \delta \mathbf{s}^2 \;=\; 0 \quad &= \quad \delta s^{||\,2} + \delta \mathbf{s}^{\perp\,2} \\ &= \quad 2\,M\,\delta s^{||} + \delta \mathbf{s}^{\perp\,2}, \end{aligned} \tag{3.45}$$

und es folgt

$$\delta s^{||} \;=\; \frac{-1}{2\,M} \sum_{\alpha=1}^{N-1} \delta s_\alpha^{\perp\,2}. \tag{3.46}$$

Nach [19] gilt diese Gleichung auch lokal für nicht-gleichförmige Fluktuationen hervorgerufen durch langwellige Spinwellen. Es ergibt sich damit für die longitudinale Korrelationsfunktion

$$\begin{aligned} G_L(\mathbf{x}) \quad &= \quad \left\langle s^{||}(\mathbf{0})\, s^{||}(\mathbf{x}) \right\rangle - \left\langle s^{||} \right\rangle^2 \\ &= \quad \left\langle \delta s^{||}(\mathbf{0})\, \delta s^{||}(\mathbf{x}) \right\rangle \\ &= \quad \frac{1}{4\,M^2} \sum_{\alpha,\beta=1}^{N-1} \left\langle \delta s_\alpha^{\perp\,2}(\mathbf{0})\, \delta s_\beta^{\perp\,2}(\mathbf{x}) \right\rangle \end{aligned} \tag{3.47}$$

und für die transversale Korrelationsfunktion

$$\begin{aligned} G_T(\mathbf{x}) \quad &= \quad \frac{1}{N-1} \left\langle \mathbf{s}^{\perp}(\mathbf{0})\, \mathbf{s}^{\perp}(\mathbf{x}) \right\rangle \\ &= \quad \frac{1}{N-1} \sum_{\alpha=1}^{N-1} \left\langle s_\alpha^{\perp}(\mathbf{0})\, s_\alpha^{\perp}(\mathbf{x}) \right\rangle \\ &= \quad \left\langle s_\alpha^{\perp}(\mathbf{0})\, s_\alpha^{\perp}(\mathbf{x}) \right\rangle, \end{aligned} \tag{3.48}$$

unabhängig von $\alpha = 1, ..., N-1$. Weil im hydrodynamischen Limes die transversalen Fluktuationen nicht miteinander wechselwirken, gilt nach [19]

$$\left\langle \delta s_\alpha^{\perp\,2}(\mathbf{0})\, \delta s_\beta^{\perp\,2}(\mathbf{x}) \right\rangle \;=\; 2\, \left\langle \delta s_\alpha^{\perp}(\mathbf{0})\, \delta s_\beta^{\perp}(\mathbf{x}) \right\rangle^2. \tag{3.49}$$

Dies in (3.47) eingesetzt liefert

$$G_L(\mathbf{x}) \;=\; \frac{1}{2\,M^2} \sum_{\alpha,\beta=1}^{N-1} \left\langle \delta s_\alpha^{\perp}(\mathbf{0})\, \delta s_\beta^{\perp}(\mathbf{x}) \right\rangle^2, \tag{3.50}$$

und mit

$$\begin{aligned} \left\langle \delta s_\alpha^{\perp}(\mathbf{0})\, \delta s_\beta^{\perp}(\mathbf{x}) \right\rangle \quad &= \quad \delta_{\alpha\beta} \left\langle \delta s_\alpha^{\perp}(\mathbf{0})\, \delta s_\alpha^{\perp}(\mathbf{x}) \right\rangle \\ &= \quad \delta_{\alpha\beta}\, G_T(\mathbf{x}) \end{aligned} \tag{3.51}$$

erhält man schließlich

$$\begin{aligned} G_L(\mathbf{x}) &= \frac{1}{2\,M^2} \sum_{\alpha=1}^{N-1} G_T^2(\mathbf{x}) \\ &= \frac{N-1}{2\,M^2}\, G_T^2(\mathbf{x}). \end{aligned} \tag{3.52}$$

Wegen des exponentiellen Abfalls der Korrelationsfunktionen folgt aus dieser Gleichung für große $\mathbf{x}$ der Zusammenhang

$$2\,\xi_L \;=\; \xi_T. \tag{3.53}$$

Diese Vorhersage scheint im Widerspruch zu dem oben hergeleiteten unterschiedlichen Verhalten der beiden Korrelationslängen mit dem äußeren Feld zu stehen, allerdings ist es möglich, daß die beiden Vorhersagen (3.44) und (3.53) für unterschiedliche Bereiche des Feldes H gelten.

Kapitel 4

Numerische Methoden

4.1 Monte-Carlo-Simulationen

Wie bereits in Kapitel 1.1 erwähnt, sind wir an dem Erwartungswert einer Observablen $\mathcal{O}$ interessiert. Die Gleichung (1.3) läßt sich auch als

$$\langle \mathcal{O} \rangle \; = \; \int \mathcal{D}\sigma \, \mathcal{O}(\sigma) \, P(\sigma) \tag{4.1}$$

mit der Gibbs-Verteilung

$$P(\sigma) \; = \; \frac{e^{-\beta \mathcal{H}(\sigma)}}{Z} \tag{4.2}$$

schreiben. Ein dabei auftretendes Problem ist, daß auch auf dem Gitter unendlich viele Konfigurationen σ existieren, über die summiert (integriert) werden müßte, was im allgemeinen nicht möglich ist. Deshalb schätzt man mit Hilfe des Monte-Carlo-Verfahrens den Erwartungswert der Observablen ab.
Betrachtet man endlich viele, aber zufällige Konfigurationen, kann der Erwartungswert als Mittelwert über diese Konfigurationen geschätzt werden. Dieses Vorgehen wird als *Simple Sampling* bezeichnet. Durch die zufällige Wahl des jeweiligen Zustandes des Systems werden allerdings auch solche gewählt, die aufgrund ihres kleinen Gewichtfaktors ($e^{-\beta \mathcal{H}(\sigma)}$) kaum zur Summe beitragen. Eine wesentliche Verbesserung der Schätzung, ohne mehr Konfigurationen zu erzeugen, erhält man, wenn man die Zustände bereits mit dem Gibbs-Gewicht verteilt wählt (*Inportance Sampling*). Für N gewählte Zustände σ_i ergibt sich der Erwartungswert der Observablen $\mathcal{O}$ dann durch

$$\langle \mathcal{O} \rangle \; = \; \frac{1}{N} \sum_{i=1}^{N} \mathcal{O}(\sigma_i). \tag{4.3}$$

Da die für $P(\sigma)$ benötigte Zustandssumme Z im allgemeinen nicht bekannt ist, besteht bei dieser Berechnung immer noch ein Problem. Man kann sich aber die Ergodenhypothese der statistischen Mechanik zunutze machen. Sie besagt, daß das zeitliche Mittel einer Observablen gleich dem Ensemble-Mittel ist. Dies bedeutet nichts anderes, als daß die Zeit, die ein physikalisches System in einer Konfiguration verbleibt, dem Gewicht dieses Zustandes in der Zustandssumme entspricht, wenn ein genügend großer Zeitraum betrachtet wird.
Mit dieser Voraussetzung kann die gewünschte Verteilung mit Hilfe eines Markov-Prozesses erzeugt werden.

4.1.1 Der Markov-Prozeß

Sei $Q(\sigma_i \to \sigma_f)$ die Wahrscheinlichkeit für den Übergang von der Konfiguration σ_i zur Konfiguration σ_f. Bei einem Markov-Prozeß werden sukzessiv neue Zustände erzeugt, wobei jede neue Konfiguration jeweils nur von der vorigen abhängt. Der Prozeß heißt ergodisch, wenn von jedem beliebigen Zustand beginnend jeder mögliche im Prinzip in endlich vielen Schritten erreicht werden kann.
Damit die Verteilung der so generierten Konfigurationen gegen die Gibbs-Verteilung $P(\sigma)$ konvergiert, muß die Bedingung *Detailed Balance*

$$P(\sigma_i)\, Q(\sigma_i \to \sigma_f) \;=\; P(\sigma_f)\, Q(\sigma_f \to \sigma_i) \tag{4.4}$$

erfüllt sein. Da bei dieser Bedingung die im allgemeinen nicht bekannte Zustandssumme auf beiden Seiten der Gleichung steht, kann sie herausgekürzt und die gewünschte Verteilung, ohne Z zu kennen, erzeugt werden. Die Schritte, die bis zum Erreichen der Verteilung benötigt werden, bezeichnet man als Thermalisierungsschritte, deren Anzahl abhängig von der gewählten Anfangskonfiguration ist.

4.1.2 Algorithmen

Man möchte nun einen möglichst effizienten Algorithmus konstruieren, der die Zustände gemäß $P(\sigma)$ erzeugt. Der erste und einfachste dieser Art war der Metropolis-Algorithmus [20] mit der relativ trivialen Vorschrift für die Übergangswahrscheinlichkeit

$$Q(\sigma_i \to \sigma_f) \;=\; p_{trial}\, p_{accept}. \tag{4.5}$$

Dabei steht p_{trial} für die Wahrscheinlichkeit, ausgehend von einem Zustand σ_i den Zustand σ_f vorzuschlagen. p_{trial} ist eigentlich beliebig, sollte allerdings symmetrisch unter der Vertauschung von σ_i und σ_f sein, um Detailed Balance zu erfüllen. Die

Akzeptanzwahrscheinlichkeit für die neue Konfiguration ist bei dem Metropolis-Algorithmus durch

$$p_{accept} \;=\; \min\left(1, \frac{P(\sigma_f)}{P(\sigma_i)}\right). \tag{4.6}$$

gegeben. Wird eine neue Konfiguration nicht akzeptiert, verbleibt das System in der alten. Damit die Akzeptanzrate auch in der Nähe eines lokalen Minimums der Wirkung möglichst groß ist, dürfen sich der neu vorgeschlagene und der alte Zustand nicht wesentlich unterscheiden, so daß mit diesem Verfahren nur lokale Änderungen, d. h. für O(N)-Modelle Änderungen einzelner Spins, ausgeführt werden. Macht man einen solchen lokalen Update für jeden Gitterpunkt, erhält man einen globalen Update. Dies hat aber den Nachteil, daß viel Rechenzeit verbraucht wird, ohne die Konfiguration wesentlich zu verändern, wodurch eine starke Korrelation zwischen den erzeugten Zuständen hervorrufen wird.
Andere lokale Update-Algorithmen sind z.B. der Heatbath- oder der Overrelaxions-Algorithmus, die beide die Situation verbessern. Doch für die Erzeugung unserer Daten haben wir einen anderen Algorithmus mit konstanter Akzeptanzrate für neue Konfigurationen verwendet, der im folgenden ausführlicher beschrieben wird.

4.1.3 Der Wolff-Cluster-Algorithmus

Swendsen und Wang haben 1987 einen neuen Monte-Carlo-Algorithmus für Spin-Modelle entwickelt, den Wolff 1989 noch ein wenig verbessert hat [21]. Die Idee dieses Algorithmus ist, eine Konfiguration in eine neue, möglichst merklich verschiedene zu verwandeln, indem viele Spins gleichzeitig verändert werden.
Wird ein System nahe dem kritischen Punkt simuliert, bilden sich sogenannte Cluster, d. h. Spinblöcke, in denen über viele Größenordnungen die Spins ungefähr die gleiche Richtung haben. Kann ein solcher Cluster ohne wesentliche Energieänderung des Systems in eine neue Richtung gedreht werden, so wird in relativ kurzer Zeit eine neue Konfiguration erzeugt, die nicht so stark mit der alten korreliert ist. Dies ist ein großer Vorteil gegenüber den oben beschriebenen lokalen Updates.
Der Wolff-Cluster-Algorithmus verwendet eine Verallgemeinerung der vom Isingmodell bekannten Spinflip-Operation ($\mathbf{s}_i \to -\mathbf{s}_i$) für das O(N)-Modell. Ein einzelner Spin $\mathbf{s}_i$ wird an einer zu einem beliebigen N-dimensionalen Einheitsvektor $\mathbf{r}$ orthogonalen Hyperfläche gespiegelt. Der neue Spin $\mathbf{s}'_i$ ergibt sich durch die Anwendung des Operators $R(\mathbf{r})$ auf den alten

$$\mathbf{s}'_i \;=\; R(\mathbf{r})\,\mathbf{s}_i \;=\; \mathbf{s}_i \,-\, 2\,(\mathbf{s}_i\,\mathbf{r})\,\mathbf{r}. \tag{4.7}$$

Die Wirkung (1.1) ist invariant unter globalen $R(\mathbf{r})$-Transformationen, denn

$$(R(\mathbf{r})\,\mathbf{s}_i)\;(R(\mathbf{r})\,\mathbf{s}_j) \;=\; \mathbf{s}_i\,\mathbf{s}_j. \tag{4.8}$$

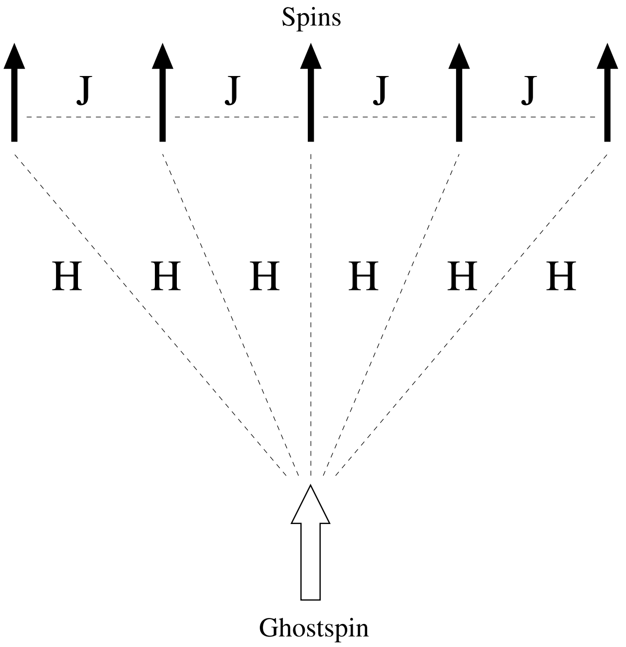


Abbildung 4.1: Kopplung der Spins untereinander und mit dem Ghostspin.

Bevor wir zu dem Algorithmus im Detail kommen, sei noch erwähnt, daß auch das äußere Feld $\mathbf{H}$ in diesen Algorithmus mit einbezogen werden kann. Jeder einzelne Spin koppelt mit der Stärke J an seine direkten Nachbarn. Man kann nun einen Ghostspin $\mathbf{S}_{Ghost}$ einführen, der das magnetisierende Feld verkörpert. Dieser Ghostspin ist Nachbar von jedem einzelnen Spin auf dem Gitter, jedoch beträgt die Kopplung mit ihm statt J nun H. Abbildung 4.1 zeigt eine vereinfachte Darstellung zur bildlichen Vorstellung dieses Zusammenhangs.
Im folgenden wird nun Schritt für Schritt ein Update mit dem Wolff-Cluster-Algorithmus für ein O(N)-Modell mit äußerem Feld beschrieben.

- Zunächst wird ein beliebiger N-dimensionaler Einheitsvektor $\mathbf{r}$ gewählt.
- Dann wählt man einen beliebigen Startspin $\mathbf{s}_x$ an der Stelle x im Gitter der Größe $V = L^d$ als ersten Spin des entstehenden Clusters.
- Daraufhin werden dessen Nachbarspins $\mathbf{s}_y$ betrachtet und mit der Wahrscheinlichkeit

$$\begin{aligned} P(\mathbf{s}_x, \mathbf{s}_y) &= 1 - e^{\min[0, J\, R(\mathbf{r})\, \mathbf{s}_x (1 - R(\mathbf{r}))\, \mathbf{s}_y]} \\ &= 1 - e^{\min[0, -2J\, (\mathbf{r}\, \mathbf{s}_x)\, (\mathbf{r}\, \mathbf{s}_y)]} \end{aligned} \tag{4.9}$$

  in den Cluster aufgenommen.

- Dieser Schritt wird nun für alle Nachbarn der aufgenommenen Spins wiederholt, wobei jeder Spin des Gitters nur einmal die Möglichkeit hat, dem Cluster zugefügt zu werden. Sobald keine neuen Spins mehr hinzukommen, ist dieser Schritt beendet.

- Auch der Ghostspin kann als Nachbar von allen Spins mit der Wahrscheinlichkeit
$$P(\mathbf{s}_x, \mathbf{S}_{Ghost}) \;=\; 1 \;-\; e^{\min[0,-2H\,(\mathbf{r}\,\mathbf{s}_x)\,(\mathbf{r}\,\mathbf{S}_{Ghost})]} \tag{4.10}$$
in den Cluster aufgenommen werden.

- Abschließend werden alle Spins des Cluster (evtl. auch der Ghostspin) an der zu $\mathbf{r}$ orthogonalen Hyperfläche mit der Vorschrift (4.7) gespiegelt.

Dieser Algorithmus ist ergodisch, denn jeder beliebige Zustand des Systems kann mit höchstens L^d Updates erzeugt werden. Außerdem wird, wie man sich leicht überzeugen kann, die Bedingung *Detailed Balance* erfüllt.

4.2 Die Fehlerbehandlung

4.2.1 Autokorrelationen und Critical Slowing Down

Immer wenn aufeinanderfolgende Konfigurationen korreliert sind, erhält man kein Ensemble unabhängiger Daten im statistischen Sinne. Für k Messungen der Observablen $\mathcal{O}$ ergibt sich der Mittelwert

$$\bar{\mathcal{O}} \;=\; \frac{1}{k}\sum_{i=1}^{k}\mathcal{O}_i \tag{4.11}$$

und die Varianz, d. h. die mittlere quadratische Abweichung des Mittelwertes vom Erwartungswert,

$$\begin{aligned}\sigma_k^2 \;&=\; \left\langle \left(\bar{\mathcal{O}} \,-\, \langle\mathcal{O}\rangle\right)^2 \right\rangle \\ &=\; \frac{1}{k^2}\sum_{i,j=1}^{k}\left\langle (\mathcal{O}_i - \langle\mathcal{O}\rangle)\,(\mathcal{O}_j - \langle\mathcal{O}\rangle)\right\rangle .\end{aligned} \tag{4.12}$$

Der statistische Fehler für den Satz von k (korrelierten) Daten kann auch mit der Autokorrelationsfunktion $\Gamma(t)$, welche über

$$\begin{aligned}\Gamma(t) \;&=\; \langle \mathcal{O}_i\,\mathcal{O}_{i+t}\rangle - \langle\mathcal{O}\rangle^2 \\ &=\; \langle (\mathcal{O}_i - \langle\mathcal{O}\rangle)\,(\mathcal{O}_{i+t} - \langle\mathcal{O}\rangle)\rangle\end{aligned} \tag{4.13}$$

definiert ist, ausgedrückt werden. Für die Varianz erhält man damit

$$\begin{aligned}\sigma_k^2 &= \sum_{t=-k+1}^{k-1} \frac{k-|t|}{k^2}\Gamma(t) \\ &= \frac{\Gamma(0)}{k} 2 \left(\frac{1}{2} + \sum_{t=1}^{k-1}\left(1-\frac{|t|}{k}\right)\frac{\Gamma(t)}{\Gamma(0)}\right). \end{aligned} \tag{4.14}$$

Für k vollkommen unkorrelierte Daten gilt $\Gamma(t) = 0$ für $t > 0$. Die Varianz ist dann einfach gegeben durch $\sigma_k^2 = \Gamma(0)/k$. Der Faktor, der die Vergrößerung des statistischen Fehlers charakterisiert, kann für einen schnellen Abfall von $\Gamma(t)$ abgeschätzt werden durch

$$\frac{1}{2} + \sum_{t=1}^{k-1}\left(1-\frac{|t|}{k}\right)\frac{\Gamma(t)}{\Gamma(0)} \approx \frac{1}{2} + \sum_{t=1}^{\infty}\frac{\Gamma(t)}{\Gamma(0)} = \tau_{int}, \tag{4.15}$$

wodurch eine integrierte Korrelationszeit τ_{int} definiert werden kann. Die Varianz korrelierter Daten ist damit um den Faktor $2\tau_{int}$ größer als für unabhängige Messungen ($\sigma_k^2 = 2\tau_{int}\Gamma(0)/k$). Anders ausgedrückt könnte man auch sagen, daß man statt eines Satzes von k korrelierten nur einen von $k/2\tau_{int}$ unkorrelierten Daten hat. Mit *Critical Slowing Down* wird der Effekt bezeichnet, daß die integrierte Korrelationszeit am kritischen Punkt mit der Gittergröße anwächst. Das Verhalten kann mit einem dynamischen kritischen Exponenten z durch

$$\tau_{int} \sim L^z \tag{4.16}$$

beschrieben werden. Der Exponent bestimmt die Effizienz eines Monte-Carlo-Algorithmus. Für lokale, wie den Metropolis- oder den Heatbath-Algorithmus, gilt $z \simeq 2$, während der Overrelaxations-Algorithmus $z \simeq 1$ hat. Für den von uns in dieser Arbeit verwendeten nicht-lokalen Wolff-Cluster-Algorithmus dagegen besteht mit $z \simeq 0$ keine Abhängigkeit der Korrelationszeit von der Gittergröße.

4.2.2 Die Jackknife-Methode

Da die bei der Simulation erzeugten Konfigurationen nicht vollkommen unabhängig voneinander sind, können auch, wie bereits beschrieben, die darauf berechneten Observablen nicht vollständig unkorreliert sein. Die sogenannte Jackknife-Methode berücksichtigt diese Korrelation und liefert gegenüber dem naiven Mittelwert eine verbesserte Schätzung einer Observablen $\mathcal{O}$ und eine Schätzung des Fehlers.
Dazu wird ein Datensatz von k Messungen einer Observablen $\mathcal{O}$ in n gleichgroße Blöcke der Länge m unterteilt, so daß $k = n \cdot m$ ist. Sei nun $\bar{\mathcal{O}}$ der Mittelwert

über den ganzen Datensatz und $\bar{\mathcal{O}}_i$ (für $i = 1, ..., n$) jeweils der Mittelwert über alle Messungen ohne den i-ten Block. Dann werden die Pseudowerte des Jackknife durch

$$J_i \;=\; n\,\bar{\mathcal{O}} - (n-1)\,\bar{\mathcal{O}}_i \tag{4.17}$$

definiert. Man erhält dadurch eine verbesserte (biaskorrigierte) Schätzung J der Observablen $\mathcal{O}$ mit der Gleichung

$$J \;=\; \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n} J_i \;=\; n\,\bar{\mathcal{O}} - (n-1)\,\hat{\mathcal{O}}, \tag{4.18}$$

wobei

$$\hat{\mathcal{O}} \;=\; \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n} \bar{\mathcal{O}}_i. \tag{4.19}$$

Der Unterschied zwischen $\hat{\mathcal{O}}$ und $\bar{\mathcal{O}}$ dient zur Schätzung der Verzerrung (Bias B) durch die Korrelationen der Daten, also

$$J \;=\; \bar{\mathcal{O}} - B \tag{4.20}$$

mit

$$B \;=\; (n-1)\left(\hat{\mathcal{O}} - \bar{\mathcal{O}}\right). \tag{4.21}$$

Für die Schätzung $\hat{\sigma}^2$ der Varianz der biaskorrigierten Schätzung J ergibt sich

$$\begin{aligned}
\hat{\sigma}^2(J) \;&=\; \frac{1}{n\,(n-1)}\sum_{i=1}^{n}(J_i - J)^2 \\
&=\; \frac{n-1}{n}\sum_{i=1}^{n}\left(\bar{\mathcal{O}}_i - \hat{\mathcal{O}}\right)^2 \\
&=\; \frac{n-1}{n}\left(\sum_{i=1}^{n}\bar{\mathcal{O}}_i^2 - n\,\hat{\mathcal{O}}^2\right).
\end{aligned} \tag{4.22}$$

Mit diesem Verfahren ist es also möglich, für jede Observable eine verbesserte Schätzung mit einem vernünftigen Fehler anzugeben. Die Methode läßt sich anwenden, wenn die Anzahl der Daten nicht zu klein ist, sofern man bei der Wahl der Blockanzahl n berücksichtigt, daß die Blocklänge größer als die Autokorrelationszeit ist, um den Fehler der jeweiligen Observablen nicht zu unterschätzen.

Kapitel 5

Numerische Resultate und Auswertung

Die Simulationen des O(4)-Spinmodells wurden auf DEC-Alpha-Workstations in Bielefeld durchgeführt. Das verwendete Fortran-90-Programm basiert auf dem bereits existierenden O(2)-Programm, das von S. Holtmann und T. Schulze für ihre Arbeiten [22] und [13] benutzt wurde. Dieses Programm, das den Wolff-Cluster-Algorithmus beinhaltet, wurde auf das O(4)-Modell umgeschrieben und etwas modifiziert. Zusätzlich wurde eine Routine programmiert, welche die benötigten Produkte der Ebenenspins im Abstand τ voneinander als Mittelwert über einige Iterationen ausgibt.
Die hier aufgeführten Daten sind auf einem dreidimensionalen kubischen Gitter mit periodischen Randbedingungen und den linearen Ausdehnungen von $L = 24$, 48, 72, 96 und 120 Gittereinheiten erzeugt worden. Die vom Programm ausgegebenen Größen sind pro Iteration jeweils die Energiedichte des Systems, die durchschnittliche longitudinale Spinkomponente $s^{\|}$, der durchschnittliche Betrag des transversalen Spinvektors $|\mathbf{s}^{\perp}|$ sowie die longitudinale F_L als auch die transversale Fouriertransformierte F_T der zugehörigen Korrelationsfunktion. Dabei werden die letzten beiden Größen separat pro Raumrichtung im Gitter gemäß (3.8) und (3.9) berechnet und anschließend gemittelt. Zusätzlich gibt das Programm neben der durchschnittlich gebildeten Clustergröße die nicht-zusammenhängenden Korrelationsfunktionen $\left\langle S_0^{\|} S_\tau^{\|} \right\rangle$ und $\left\langle \mathbf{S}_0^{\perp} \mathbf{S}_\tau^{\perp} \right\rangle$ mit Hilfe von Ebenenspins für die Abstände $\tau = 0, 1, ..., L/2$ aus. Um Speicherplatz zu sparen, erfolgen diese Ausgaben nur als Mittelwert über je 500 Iterationen. Mit all diesen Größen können die relevanten Observablen wie die Magnetisierung M, die Suszeptibilitäten χ_L und χ_T und die Korrelationslängen ξ_L und ξ_T berechnet werden. Wir haben hierfür ein Auswertungsprogramm benutzt, das diese Observablen mit Hilfe des Jackknife-Verfahrens mit zehn Blöcken berechnet. So ist es möglich, für alle Größen einen vernünftigen Fehler angeben zu können.

Pro Gittergröße und bei vorher festgelegter Kopplung $J = 1/T$ und äußerem Feld H wurden Daten mit einer Statistik von meistens 20000 Messungen erzeugt. Ausgehend von einer geordneten Startkonfiguration wurde vor Beginn der Messungen ausreichend thermalisiert, indem je nach Kopplung 10000 bis 50000 Thermalisierungsschritte durchgeführt wurden. Um möglichst unkorrelierte Daten zu erhalten, wurde die Anzahl der Cluster-Updates zwischen den einzelnen Messungen jeweils so variiert, daß die integrierte Autokorrelationszeit (4.15) der Magnetisierung und der Energie für die kleinen Gitter ($L \leq 48$) möglichst kleiner als drei und für die großen Gitter kleiner als fünf war. Je nach Kopplung und Feld gibt es hierfür gravierende Unterschiede in der nötigen Anzahl der Updates. Für $J < J_c$ und $H \gtrsim 0$ müssen viele Updates gemacht werden, um eine weitgehend unabhängige Konfiguration zu erzeugen, da die gebildeten Cluster sehr klein sind. Dagegen kann ein Spincluster bei $J > J_c$ oder auch generell bei großem H sehr groß werden (bis zu 25% des gesamten Gittervolumens), so daß zwischen einzelnen Messungen nicht viele Updates nötig sind.

Die in dieser Arbeit verwendeten Parameter wie die kritischen Exponenten, die kritische Kopplung J_c und die Normierungen T_0 und H_0 stammen aus [4] und sind in Tabelle 5.1 aufgelistet. Diese Werte werden im folgenden in allen auftretenden Gleichungen und bei späteren Fits als konstant betrachtet, wobei mögliche Fehler in diesen Parametern außer acht gelassen werden.

β	δ	γ	ν	ν_c	J_c	T_0	H_0
0.380	4.86	1.4668	0.7423	0.4019	0.93590	1.093	5.08

Tabelle 5.1: Verwendete kritische Exponenten, kritische Kopplung und Normierungen für das O(4)-Modell.

5.1 Vergleich der Methoden zur Bestimmung der Korrelationslängen

Befassen wir uns zunächst mit einem Vergleich der in Kapitel 3.1 vorgestellten Verfahren, die Korrelationslängen ξ_L und ξ_T zu schätzen. Die Korrelationslängen werden mit dem Fourier-Verfahren bestimmt, indem mit dem Programmoutput erst Mittelwerte über alle (meist 20000) Messungen gebildet und damit dann unter anderem χ_L, χ_T, F_L und F_T mit der Jackknife-Methode berechnet werden. Daraus werden ξ_L^F und ξ_T^F gemäß der Gleichungen (3.11) und (3.12) berechnet. Nähere Informationen zum Verhalten der Fouriertransformierten F_L und F_T der Korrelationsfunktionen findet man in Anhang A.

Für die zwei weiteren Verfahren werden die Korrelationslängen mit Hilfe der Ebenenspins geschätzt. Die Ausgaben $\left\langle S_0^{\|} S_\tau^{\|} \right\rangle$ und $\langle \mathbf{S}_0^{\perp} \mathbf{S}_\tau^{\perp} \rangle$ für ein festes τ sind in der Regel mit 40 Werten und der Jackknife-Methode erzeugt worden. Die dort eingehenden 40 Werte sind ihrerseits Mittelwerte über 500 Messungen, für die wiederum jeweils über alle drei Raumrichtungen im Gitter gemittelt wurde. Das zweite Moment μ_2 für die 2nd-Moment-Korrelationslängen wird separat für den longitudinalen und transversalen Anteil nach Gleichung (3.25) berechnet. Dabei wird bei der Berechnung von ξ_L^{2nd} für $\langle S^{\|} \rangle$ die Magnetisierung M eingesetzt, während bei ξ_T^{2nd} der Erwartungswert $\langle \mathbf{S}^{\perp} \rangle$ verschwinden sollte und deshalb auf null gesetzt wird. Das nullte Moment μ_0 sollte exakt der jeweiligen Suszeptibilität entsprechen, was wir durch einige Tests auch bestätigen konnten. Deshalb können hierfür die bereits vorliegenden Werte von χ_L bzw. χ_T eingesetzt werden.

ξ_L^{Fit} und ξ_T^{Fit} werden bestimmt, indem separat der longitudinale und der transversale Anteil der Korrelationsfunktion $\bar{G}(\tau) = \left(\langle \mathbf{S}_0 \mathbf{S}_\tau \rangle - \langle \mathbf{S} \rangle^2 \right) L^2$ für $\tau = 0, 1, ..., L/2$ gegen τ aufgetragen und anschließend mit der Funktion (3.31)

$$\bar{G}(\tau) \;=\; c \left(e^{-\frac{\tau}{\xi^{Fit}}} + e^{-\frac{(L-\tau)}{\xi^{Fit}}} \right)$$

gefittet wird. Abbildung 5.1 zeigt die Daten für den longitudinalen und Abbildung 5.2 für den transversalen Anteil bei der Kopplung $J = 0.95$ und dem Feld $H = 0.001$

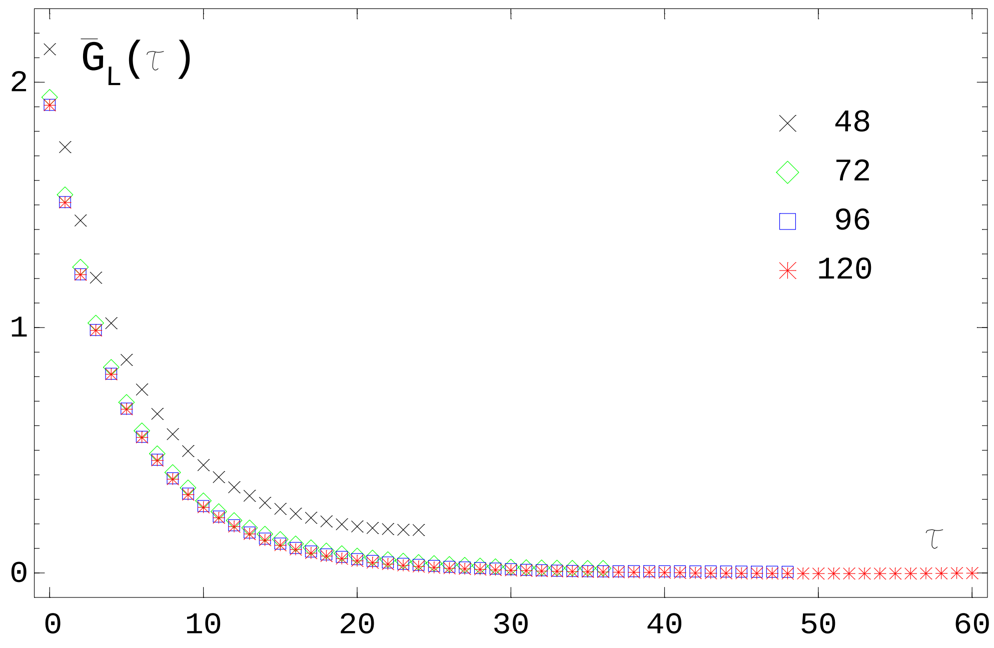


Abbildung 5.1: Die longitudinale Korrelationsfunktion für $L = 48$, 72, 96 und 120 bei der Kopplung $J = 0.95$ ($T < T_c$) und äußerem Feld $H = 0.001$.

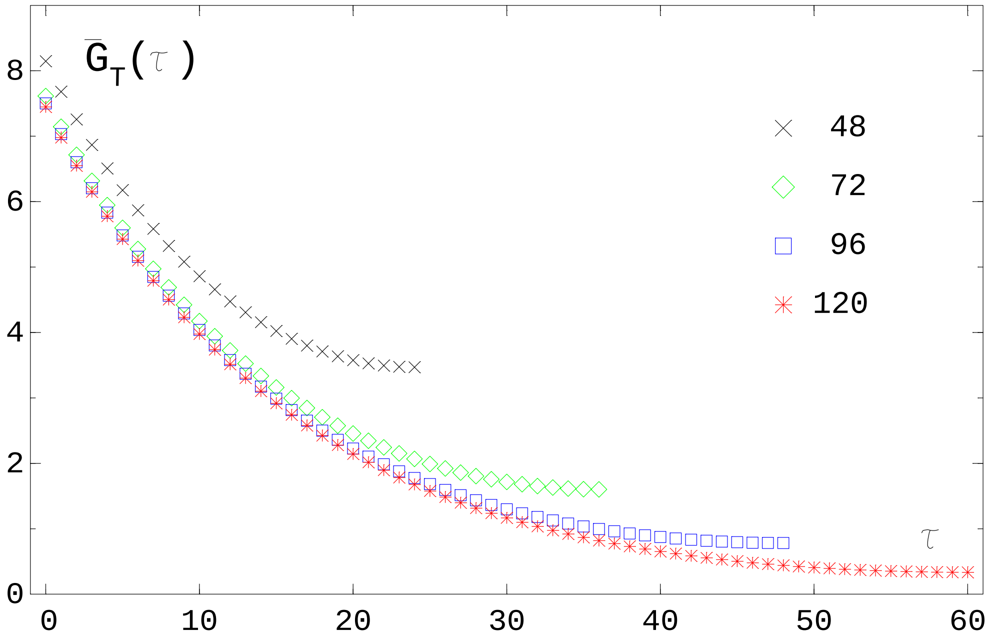


Abbildung 5.2: Die transversale Korrelationsfunktion für $L = 48$, 72, 96 und 120 bei $J = 0.95$ ($T < T_c$) und $H = 0.001$.

für die Gitter mit einer Ausdehnung von $L = 48$, 72, 96 und 120.
Die Korrelationsfunktionen der einzelnen Gitter liegen nicht exakt aufeinander. Der Grund hierfür ist ein Finite-Size-Effekt in den Größen $\left\langle S_0^{\|} S_\tau^{\|} \right\rangle$ und M bzw. $\langle \mathbf{S}_0^{\perp} \mathbf{S}_\tau^{\perp} \rangle$, der besonders für kleine τ auffällig ist, und zusätzlich spielen die periodischen Randbedingungen eine Rolle, wie besonders für große τ sichtbar wird.
In diesem speziellen vorliegenden Fall ($J = 0.95$ und $H = 0.001$) liegt ξ_L in der Größenordnung von fünf, d. h., es gilt $\bar{G}(5) \approx 1/e\, \bar{G}(0)$. Es läßt sich erkennen, daß sowohl die longitudinale Korrelationsfunktion des 72er, des 96er als auch die des 120er Gitters rasch auf null abfallen, aber die des 48er Gitters nicht die null erreicht (Abbildung 5.1). Die periodischen Randbedingungen bewirken nämlich, daß die aufgetragenen Werte $\bar{G}(\tau)$ zusätzlich noch $\bar{G}(L - \tau)$ beinhalten. Ist die Korrelationslänge klein gegenüber der Ausdehnung des Gitters, ist dieser Effekt kaum sichtbar, jedoch spielt er für das 48er Gitter in diesem Fall durchaus eine Rolle.
Daß die periodischen Randbedingungen stets berücksichtigt werden müssen, macht Abbildung 5.2, welche die transversale Korrelationsfunktion für verschiedene Gittergrößen bei denselben äußeren Parametern ($J = 0.95$ und $H = 0.001$) zeigt, deutlich. Für die transversale Korrelationslänge findet man $\xi_T \approx 16$, so daß der Abfall der Funktionen $\bar{G}_T(\tau)$ wesentlich schwächer als der von $\bar{G}_L(\tau)$ ist. Zusätzlich sind die aufgetragenen Werte selbst bei den größten Gittern aufgrund der periodischen Randbedingungen bei großen Abständen höher als im thermodynamischen

Limes. Ein konkretes Beispiel soll dies veranschaulichen. Für das 96er Gitter ist $\bar{G}_T(48) \approx 0.1\ \bar{G}_T(0)$, obwohl für eine Korrelationslänge von der Größe 16 die Amplitude bei $\tau = 48$ auf nur 5% ($\approx e^{-48/16} = e^{-3}$) der maximalen Amplitude abgefallen sein sollte. Die zusätzlichen 5% resultieren aus dem Beitrag $\bar{G}(L-\tau)$. Für kleine τ dagegen ist dieser Beitrag nahezu null und hat somit kaum einen Einfluß. Dieses Beispiel macht die Notwendigkeit des L-abhängigen Ansatzes (3.31) für die Fit-Funktion, der die periodischen Randbedingungen berücksichtigt, deutlich. Ein Fit mit der Funktion (3.30) dagegen würde vor allem bei großen Korrelationslängen und kleinen Gitterausdehnungen ungenaue Ergebnisse liefern.
Auffällig ist außerdem, daß besonders für den longitudinalen Anteil der Abfall gerade für kleine τ stärker ist, als ihn die Fit-Funktion beschreibt. Dieses Verhalten resultiert aus dem Beitrag höherer Zustände mit kleineren Korrelationslängen (vgl. Kapitel 3.1). Dieses Problem kann man versuchen zu umgehen, indem man $\bar{G}(\tau)$ erst ab einem gewissen τ_{min} fittet, weil der Einfluß der höheren Zustände bei den niedrigsten τ am größten ist. Da die Abweichung der Daten vom Verhalten (3.31) aber unterschiedlich für verschiedene Gittergrößen, Kopplungen und Felder ist, ist es unmöglich, ein einheitliches Verfahren zu verwenden, bei dem der Fit immer die Daten optimal repräsentiert. Wir haben uns dazu entschieden, repäsentativ stets drei verschiedene Startpunkte für den Fit zu benutzen. Pro L, J und H wird $\bar{G}(\tau)$ ab $\tau_{min} = 1$, 3 und 5 bis jeweils $\tau = L/2$ mit (3.31) gefittet. Diese drei sich dabei ergebenden möglicherweise leicht verschiedenen Werte für die Korrelationslängen werden nun mit denen der anderen Verfahren verglichen.
Die Abbildungen 5.3 (a) und (b) zeigen als Beispiel die drei sich ergebenden Fit-Ergebnisse zusammen mit den Daten für das Gitter mit der Ausdehnung $L = 72$ bei $J = 0.94$ und $H = 0.0005$. Allein durch das Betrachten dieser Abbildungen wird deutlich, daß die Fits je nach τ_{min} unterschiedliche Ergebnisse für die Korrelationslängen liefern können. Als ein repräsentatives Beispiel sind für diesen Fall die Resultate aller Verfahren in Tabelle 5.2 aufgelistet.

	ξ^F	ξ^{2nd}	$\xi^{Fit}(1)$	$\xi^{Fit}(3)$	$\xi^{Fit}(5)$
longitudinal	9.339(110)	8.634(131)	8.892(3)	9.247(3)	9.546(4)
transversal	19.224(60)	12.315(59)	19.228(3)	19.238(4)	19.239(4)

Tabelle 5.2: Resultate für ξ_L und ξ_T bei $L = 72$, $J = 0.94$ ($T < T_c$) und $H = 0.0005$ für die verschiedenen Verfahren. Die Werte in den Klammern bei ξ^{Fit} geben jeweils τ_{min} an.

Die Ergebnisse für ξ_L sind leicht verschieden, während die ξ_T-Werte gut übereinstimmen, abgesehen vom stark abweichenden Ergebnis der 2nd-Moment-Berechnung.
Die Unterschiede, die sich durch die verschiedenen Methoden zur Bestimmung der Korrelationslängen ergeben, sind allerdings abhängig von Gittergröße, Kopplung und Feld und können stark variieren. Um die Verfahren besser miteinander vergleichen zu können, betrachten wir nun die fünf verschiedenen Resultate für die Korre-

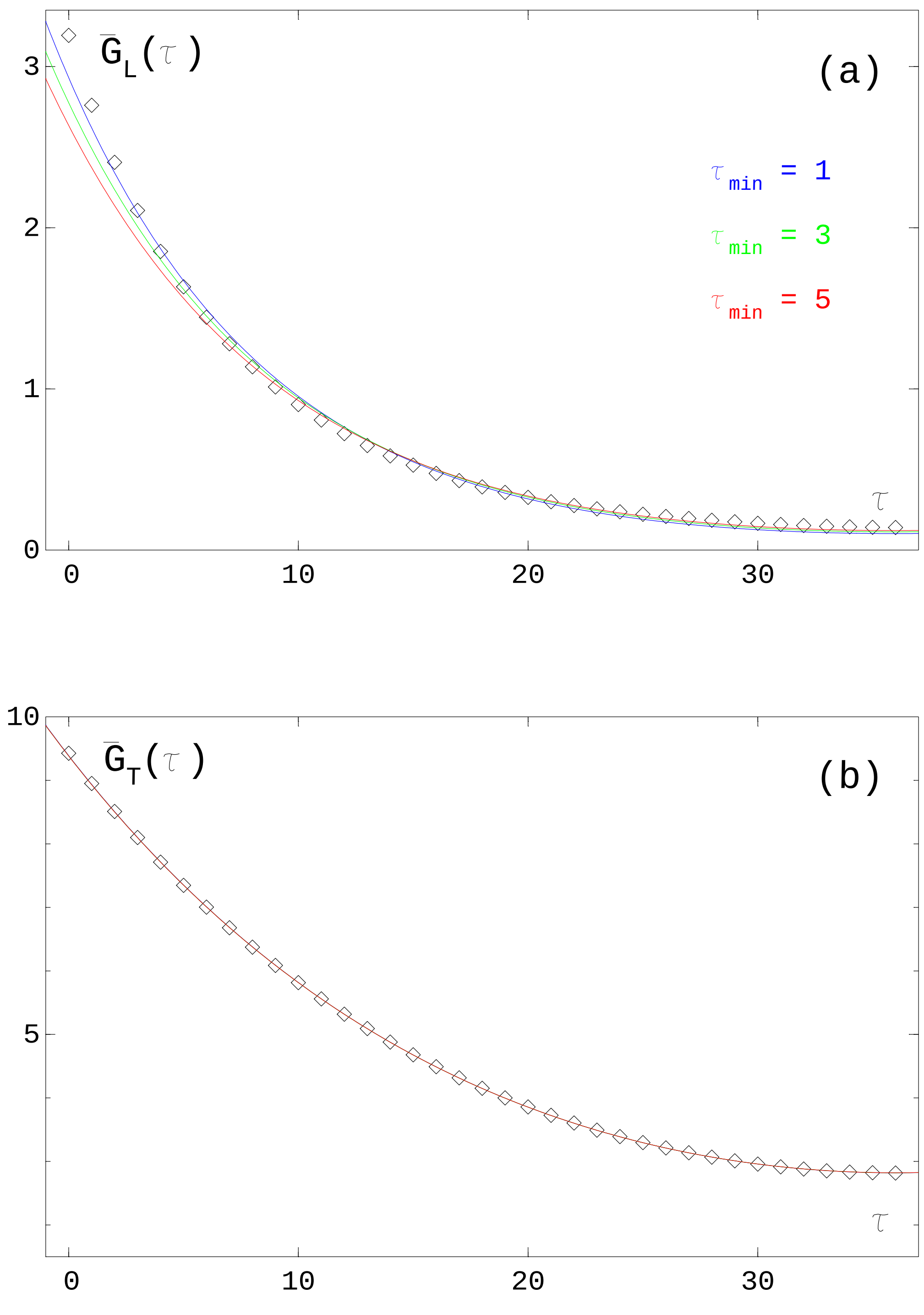


Abbildung 5.3: Die longitudinale (a) und die transversale Korrelationsfunktion (b) für das 72er Gitter bei $J = 0.94$ ($T < T_c$) und $H = 0.0005$ zusammen mit den Ergebnissen der Fits mit drei verschiedenen τ_{min}.

lationslängen jeweils für eine Gittergröße bei einer festen Kopplung in Abhängigkeit vom äußeren Feld.
Für die transversale Korrelationslänge stellt sich heraus, daß sich die Fit-Resultate für alle L, J und H kaum unterscheiden und auch stets mit dem durch das Fourier-Verfahren erhaltenen Wert übereinstimmen. Die 2nd-Moment-Korrelationslänge ist dagegen allerdings bei kleinem Feld deutlich zu gering. Die Abbildungen 5.4 und 5.5 verdeutlichen dies anhand von zwei konkreten Beispielen. Sie zeigen die Resultate für das 72er Gitter in der symmetrischen ($J = 0.93 < J_c$) und der gebrochenen Phase ($J = 0.95 > J_c$). Für Felder $H > 0.005$ stimmen jeweils alle fünf Werte innerhalb der Fehlergrenzen überein.
Bei der longitudinalen Korrelationslänge verhält es sich anders. In der symmetrischen Phase sind auch hier die drei Fit-Ergebnisse stets innerhalb der Fehlergrenzen identisch mit ξ_L^F, und ξ_L^{2nd} ist hier ebenfalls für kleine Felder zu gering (vgl. Abbildung 5.6). In der gebrochenen Phase dagegen gehen auch die Fit-Resultate für kleinere Felder immer weiter auseinander, so daß bei kleinem H fünf verschiedene Werte für ξ_L vorliegen. Die Abbildungen 5.7, 5.8 und 5.9 zeigen die erhaltenen Resultate für die Gitterlängen $L = 72$ und 96 bei der Kopplung $J = 0.95$ bzw. die des 72er Gitters bei $J = 1.0$. Auffällig ist erneut die geringe Größe von ξ_L^{2nd} bei kleinem H und die stets gleiche Reihenfolge der Werte $\xi_L^{Fit}(1)$, $\xi_L^{Fit}(3)$ und $\xi_L^{Fit}(5)$. Je größer τ_{min} gewählt wird, desto größer ist auch das Fit-Resultat der longitudinalen Korrelationslänge in der gebrochenen Phase. Dies bedeutet, daß hier durchaus

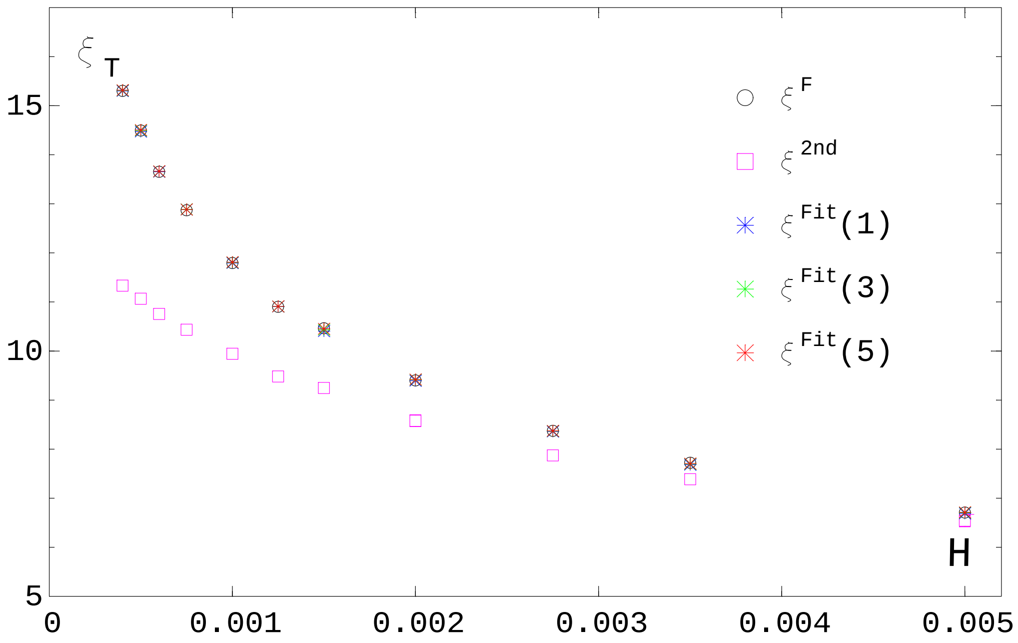


Abbildung 5.4: ξ_T in Abhängigkeit von H für $L = 72$ bei $J = 0.93$ ($T > T_c$).

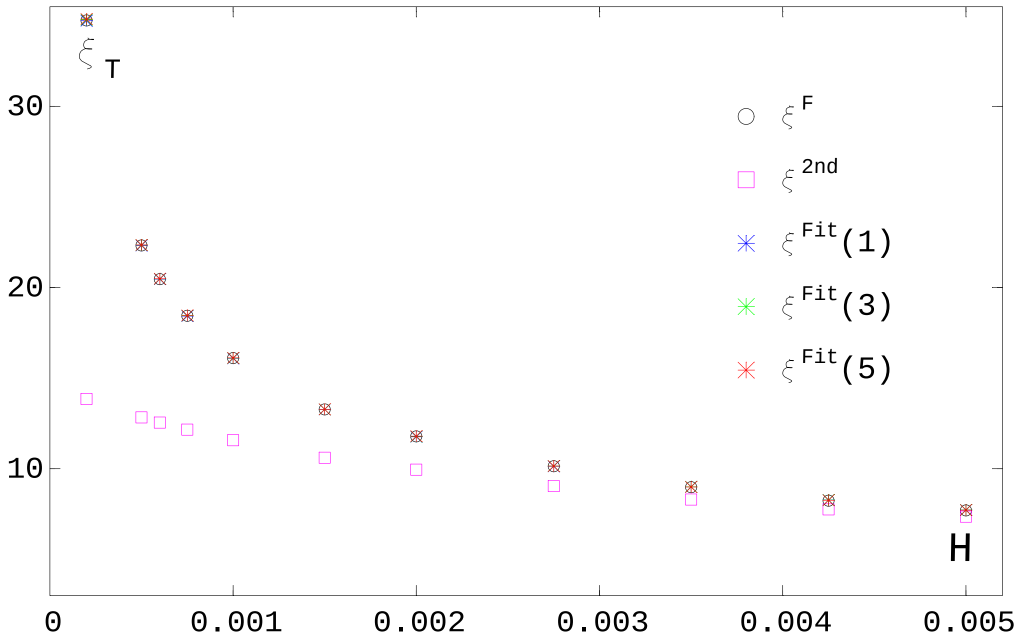


Abbildung 5.5: ξ_T in Abhängigkeit von H für $L = 72$ bei $J = 0.95$ ($T < T_c$).

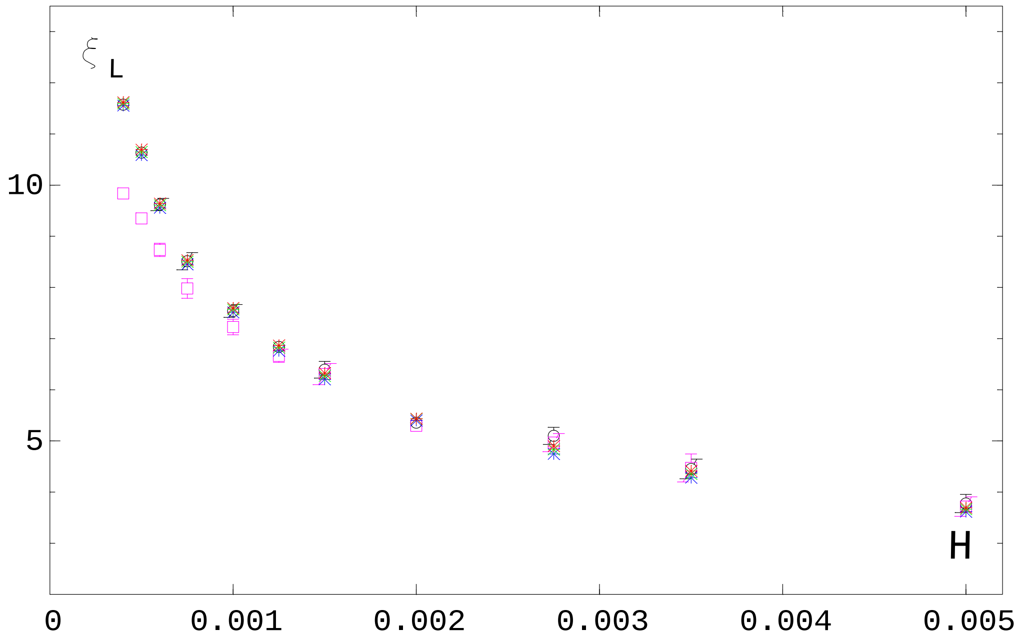


Abbildung 5.6: ξ_L in Abhängigkeit von H für $L = 72$ bei $J = 0.93$ ($T > T_c$).

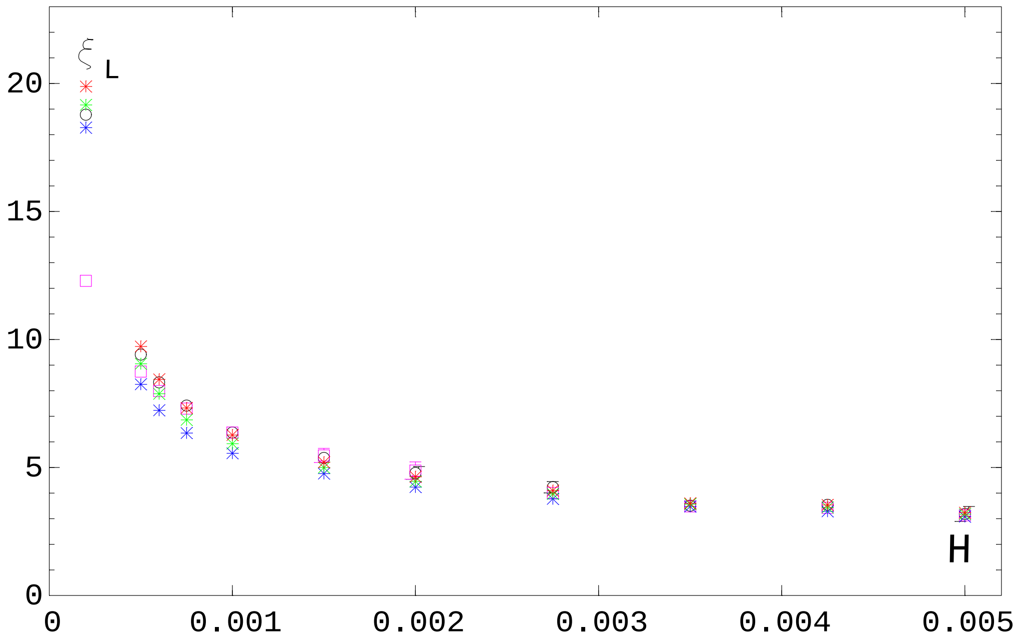


Abbildung 5.7: ξ_L in Abhängigkeit von H für $L = 72$ bei $J = 0.95$ ($T < T_c$).

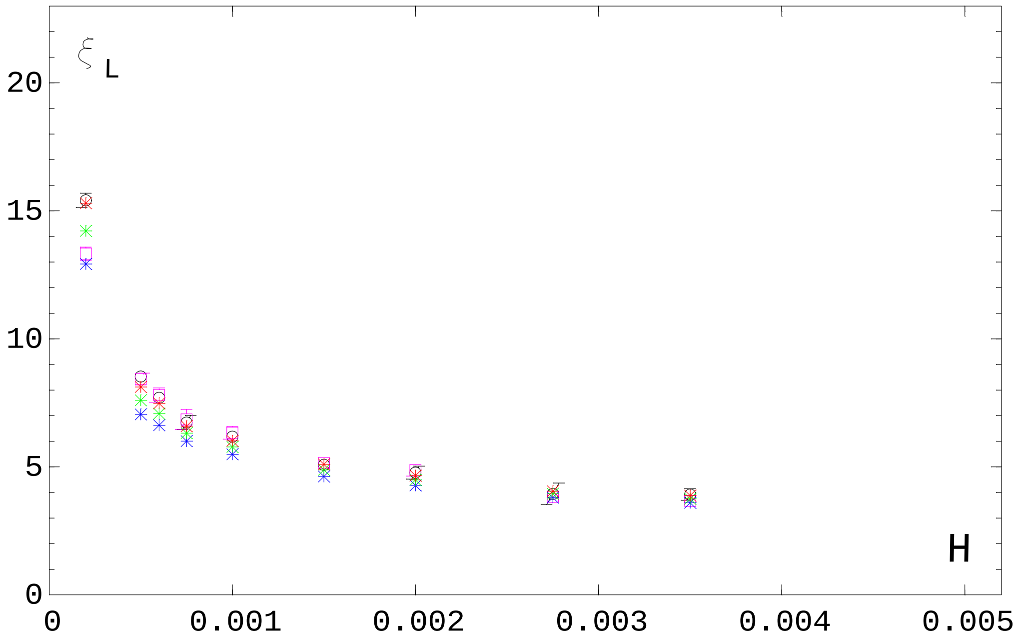


Abbildung 5.8: ξ_L in Abhängigkeit von H für $L = 96$ bei $J = 0.95$ ($T < T_c$).

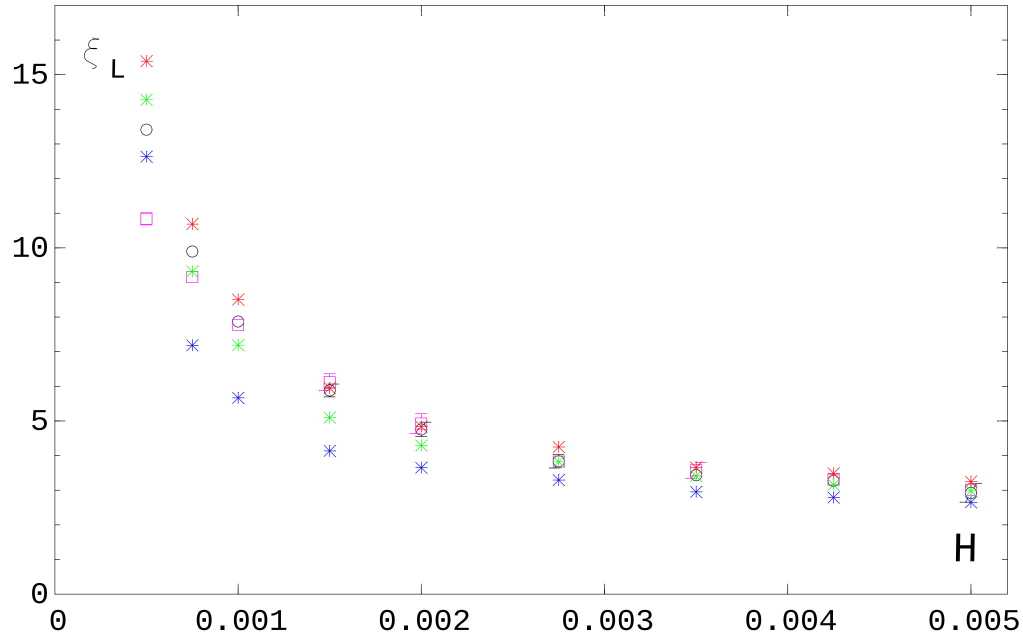


Abbildung 5.9: ξ_L in Abhängigkeit von H für $L = 72$ bei $J = 1.0$ $(T < T_c)$.

höhere Zustände beitragen, wie in Kapitel 3.1 beschrieben. ξ_L^F stimmt in den meisten Fällen mit $\xi_L^{Fit}(5)$ überein oder liegt zumindest zwischen $\xi_L^{Fit}(3)$ und $\xi_L^{Fit}(5)$. Demnach liefert das Fourier-Verfahren vermutlich eine relativ gute Schätzung für die exponentielle Korrelationslänge, da es die höheren Zustände kaum zu berücksichtigen scheint.

Abschließend lassen sich nun folgende Schlußfolgerungen ziehen. Die 2nd-Moment-Korrelationslängen sind im Vergleich die schlechtesten Schätzungen von ξ_L^{exp} und ξ_T^{exp}, weil sie für kleine Felder sehr starke Finite-Size-Effekte aufweisen. Ist die Gittergröße allerdings groß gegenüber der jeweiligen Korrelationslänge, liefert auch dieses Verfahren sowohl für den longitudinalen als auch für den transversalen Anteil brauchbare Ergebnisse. Dies ist zum einen an der Übereinstimmung von ξ^{2nd} mit den Resultaten der anderen Verfahren jeweils für größere Felder ($\hat{=}$ kleineren Korrelationslängen) und andererseits an der Abnahme der Abweichung von ξ^{2nd} gegenüber den anderen Werten mit größeren Gittern zu erkennen. Ein Vergleich von den Abbildungen 5.7 (72er Gitter) und 5.8 (96er Gitter) bei dem kleinsten Feld $H = 0.0002$ macht diesen allgemeinen Zusammenhang an einem konkreten Beispiel $(J = 0.95)$ deutlich. Dennoch werden die 2nd-Moment-Korrelationslängen im Rest dieser Arbeit nicht mehr betrachtet, da bessere Verfahren zur Schätzung von ξ_L^{exp} und ξ_T^{exp} auch bei kleinen Gittern und kleinen Feldern existieren.

Bei der transversalen Korrelationslänge liegen immer die drei Fit-Ergebnisse für alle Kopplungen sowie bei der longitudinalen Korrelationslänge für $J < J_c$ bei allen Feldern innerhalb der Fehlergrenzen des mit dem Fourier-Verfahren ermittelten Wertes. Somit können hier alle vier Werte zur weiteren Auswertung benutzt werden, zumal das χ^2/dof für alle Fits hier immer um eins oder sogar darunter liegt. Nur bei der longitudinalen Korrelationslänge für $J > J_c$ ist bei kleinen Feldern der Wert der Korrelationslänge nicht eindeutig, da hier die verschiedenen Verfahren unterschiedliche Resultate liefern. Das χ^2/dof kann teilweise in Extremfällen sogar 20 erreichen, so daß man dem Resultat für ξ_L^{Fit} bei $J > J_c$ nicht immer vertrauen kann. Wie wir gesehen haben, sind vor allem für große ξ_L (kleines H) die Fit-Ergebnisse für $\tau_{min} =$ 1, 3 und 5 merklich verschieden. Das Resultat $\xi_L^{Fit}(1)$ ist fast immer zu gering, denn die höheren Zustände mit kleinen Korrelationslängen spielen für ξ_L in der gebrochenen Phase bei kleinem H eine erhebliche Rolle. Berücksichtigt man beim Fit nicht die Werte $\bar{G}_L(\tau)$ für kleine τ, so kann deren Einfluß teilweise unterdrückt werden. Doch läßt sich schwer entscheiden, welche die beste Wahl von τ_{min} ist. Tests bei den größten Gittern haben gezeigt, daß der Wert ξ_L^{Fit} für wachsende τ_{min} immer weiter steigt, ohne jemals ein Plateau zu erreichen. Somit besteht die Schwierigkeit der fehlenden Eindeutigkeit des Fit-Verfahrens für alle L, J und H. Dennoch liefert diese Methode auch für $J > J_c$ sehr gute, mit ξ_L^F verträgliche Ergebnisse, wenn die Korrelationslänge nicht allzu groß ist. Für $\xi_L \lesssim 10$ reicht die Wahl $\tau_{min} = 5$ vollkommen aus, wie beispielsweise die Abbildungen 5.7 und 5.8 zeigen.

Das Fourier-Verfahren dagegen liefert auch glaubhafte Resultate für große Korrelationslängen, da es in der gebrochenen Phase die höheren Zustände in der longitudinalen Korrelationslänge kaum zu berücksichtigen scheint. Man erhält damit für alle Parameter-Kombinationen sowohl für ξ_L als auch für ξ_T gute Ergebnisse. Außerdem ist der Fehler von ξ^F zwar größer als die Fehler der einzelnen Fit-Resultate, doch erhält man so einen Wert mit realistischem Fehler, der die Werte aller Verfahren vereinigt. Aufgrund dieser Überlegungen haben wir uns dazu entschieden, in den folgenden Auswertungen hauptsächlich die mit dem Fourier-Verfahren ermittelten Korrelationslängen zu verwenden. Wenn nun also in den nächsten Kapiteln kein Index an den Korrelationslängen steht, ist immer ξ^F gemeint, wenn nicht ausdrücklich auf ein anderes Verfahren hingewiesen wird.

Für große Korrelationslängen scheint diese Methode ideal, doch für kleine, d. h. in der Größenordnung von nur einigen Gittereinheiten ($\xi \lesssim 5$), hat dieses Verfahren einige Schwierigkeiten. Der relative Fehler ist dann ziemlich groß, und außerdem kommt es hier zu größeren Schwankungen. Der Grund hierfür liegt darin, daß bei kleinen Korrelationslängen die ihrerseits mit Fehlern behafteten Größen $\chi_{L,T}$ und $F_{L,T}$, deren Quotient in die Berechnung von $\xi_{L,T}$ einfließt, nahezu gleich groß sind (vgl. Anhang A). Vor allem bei der longitudinalen Komponente macht sich dies bemerkbar, da hierfür nur ein Drittel der Statistik der transversalen Komponenten vorliegt. In Abbildung 5.10 sind nochmals die verschiedenen Verfahren im Vergleich für ein Gitter mit der Länge $L = 96$ bei der kritischen Kopplung aufgetragen. Innerhalb der Fehlergrenzen sind auch hier alle drei Fit-Resultate (fast) immer mit denen des Fourier-Verfahrens identisch. Die Werte ξ_L^F schwanken allerdings, während die Werte ξ_L^{Fit} für alle drei τ_{min} eine glatte Kurve beschreiben. Für genaue Analysen bei nicht zu großem ξ macht es somit durchaus Sinn, die Fit-Resultate zu betrachten. Verwenden wir im folgenden diese Werte, so sind sie jeweils mit ξ^{Fit} gekennzeichnet, wobei dann stets $\tau_{min} = 5$ gewählt wurde, weil mit diesem Wert diese Methode stets die besten Resultate zu liefern scheint.

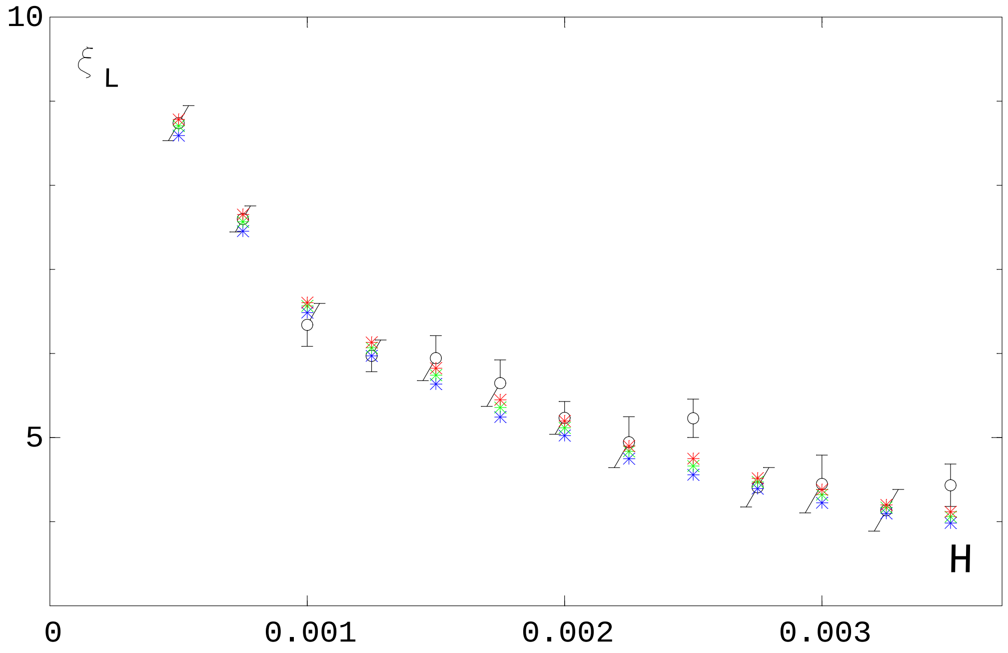


Abbildung 5.10: ξ_L in Abhängigkeit von H für $L = 96$ bei $J_c = 0.9359$ ($T = T_c$).

5.2 Verhalten der Korrelationslängen bei T_c

In diesem Kapitel soll das Verhalten der Korrelationslängen bei der kritischen Temperatur untersucht werden. Hierzu betrachten wir zunächst die Abhängigkeit der Korrelationslängen vom äußeren Feld. Die Abbildungen 5.11 und 5.12 zeigen die Korrelationslängen als Funktion von H, und die Tabelle 5.3 gibt den jeweils verwendeten Simulationsbereich an.

L	H
24	0.0002 - 0.04
48	0.0001 - 0.01
72	0.0005 - 0.01
96	0.0005 - 0.0035

Tabelle 5.3: Simulationsbereiche der einzelnen Gitter am kritischen Punkt.

In diesen Abbildungen werden für ξ_T und ξ_L Unterschiede im Finite-Size-Verhalten deutlich. Während die longitudinale Korrelationslänge auf kleinen Gittern zu groß ist, ist die transversale bei kleinem L zu gering. Außerdem ist ein Finite-Size-Effekt bei ξ_L für einen größeren Bereich des äußeren Feldes sichtbar als bei ξ_T.
Wegen des Verhaltens (2.7) können die Datenpunkte mit der Funktion der Form

$$\xi_{T,L} \;=\; \xi^c_{T,L}\, H^{-\nu_c} \tag{5.1}$$

mit festem $\nu_c = 0.4019$ gefittet werden. ξ^c_T und ξ^c_L sind dabei die freien Parameter, welche die Amplituden der jeweiligen Korrelationslänge beschreiben, mit denen dann das Amplitudenverhältnis berechnet werden kann.
Da eventuell auch *Corrections to Scaling* berücksichtigt werden müssen, haben wir zunächst die Punkte mit der Funktion

$$\xi_{T,L} \;=\; \xi^c_{T,L}\, H^{-\nu_c}\, \left(1 + c_{T,L}\, H^{\omega\nu_c}\right), \tag{5.2}$$

welche den ersten Korrekturterm beinhaltet, mit festem $\omega = 0.8$ gefittet. Dabei stellte sich allerdings heraus, daß die Koeffizienten c_T und c_L mit null verträglich sind.
Zur Bestimmung von ξ^c_T wurden jeweils die Datenpunkte für die größten Gitter in dem H-Intervall $[0.0005, 0.01]$ verwendet. Mehrere Fits mit dem Ansatz (5.1) lieferten bei Variation des Fitintervalls stets dasselbe Ergebnis

$$\xi^c_T \;=\; 0.840(1) \tag{5.3}$$

mit $\chi^2/dof \approx 0.8$.
Um die Amplitude ξ^c_L zu bestimmen, haben wir ausschließlich Daten des 72er Gitters

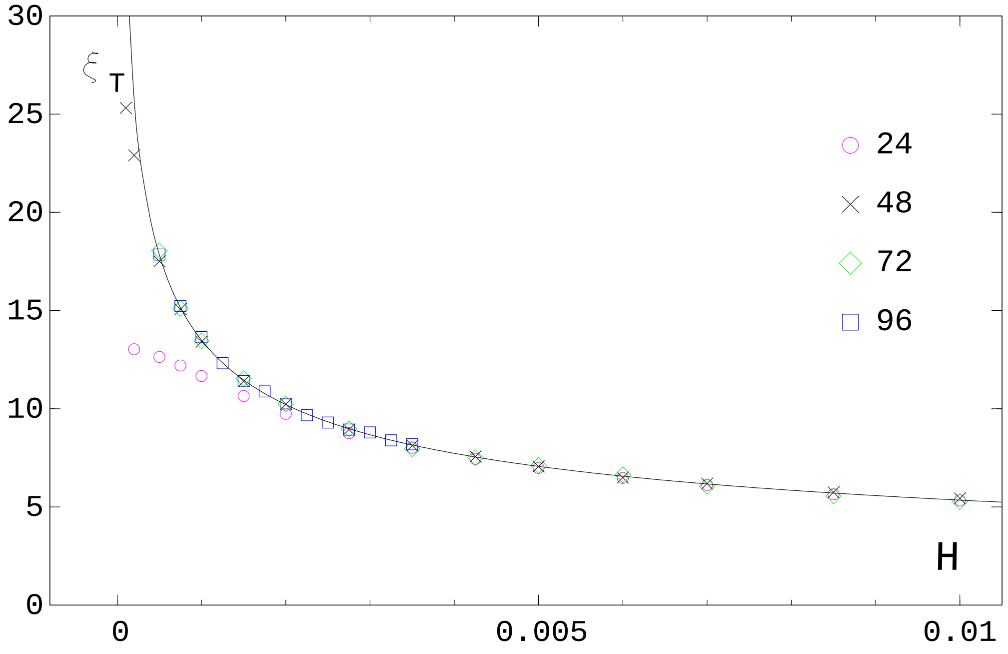


Abbildung 5.11: ξ_T in Abhängigkeit von H bei $T = T_c$ für vier verschiedene Gittergrößen zusammen mit Resultat des Fits.

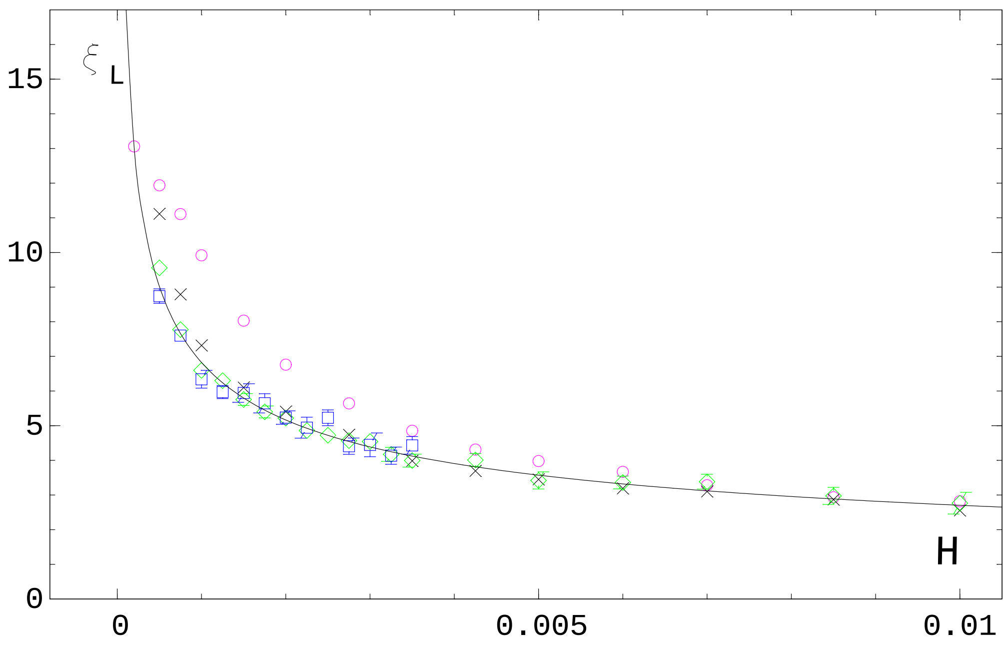


Abbildung 5.12: ξ_L in Abhängigkeit von H bei $T = T_c$ für vier verschiedene Gittergrößen zusammen mit Resultat des Fits.

als Approximation des Limes unendlichen Volumens verwendet, da im H-Intervall $[0.00075, 0.01]$ die longitudinale Korrelationslänge für $L = 72$ und $L = 96$ innerhalb der Fehler identisch ist, die Werte des 72er Gitters aber aufgrund besserer Statistik kleinere Fehler haben. Kleine Felder wurden wegen des dort auftretenden Finite-Size-Effekts nicht berücksichtigt. Auch hier wurde die Anzahl der verwendeten Punkte im H-Intervall $[0.00075, 0.01]$ variiert, und wir erhalten so

$$\xi_L^c = 0.425(2) \tag{5.4}$$

mit ($\chi^2/dof \approx 0.7$).
Die sich mit diesen beiden Amplituden ergebenden Funktionen $\xi_{T,L}(H)$ sind ebenfalls in den Abbildungen 5.11 und 5.12 als durchgezogene Linien eingezeichnet. Das universelle Amplitudenverhältnis errechnet sich zu

$$\frac{\xi_T^c}{\xi_L^c} \;=\; 1.977(10) \tag{5.5}$$

in guter Übereinstimmung mit der theoretischen Vorhersage $\xi_T \approx 2\xi_L$ aus Kapitel 3.2, die für den Fall $H \to 0$ nahe der Koexistenzlinie gilt.
Wird dieselbe Analyse mit den Werten ξ^{Fit}, die jeweils einen deutlich kleineren Fehler haben und kaum statistische Schwankungen aufweisen, durchgeführt, ergeben sich die gleichen Ergebnisse, allerdings bei wesentlich schlechterem χ^2/dof ($\lesssim 10$). Dies ist ein Anzeichen für die Unterschätzung des Fehlers bei der Bestimmung der Korrelationslängen mit dem Fit-Verfahren.
Die Amplituden ξ_T^c und ξ_L^c können auch noch mit einem anderen Verfahren bestimmt werden. Ausgangspunkt ist das Finite-Size-Verhalten (2.40) der Korrelationslängen bei $t = 0$ mit dem kritischen Exponenten $1/y_h = \nu_c$

$$\xi(H, L) \;=\; L\, Q_\xi \left(H L^{\frac{1}{\nu_c}} \right), \tag{5.6}$$

wobei *Corrections-to-Scaling*-Terme vernachlässigt sind. Die Finite-Size-Skalenfunktion Q_ξ wird noch am Ende dieses Kapitels separat für ξ_T und ξ_L betrachtet. Wegen (2.7) muß im thermodynamischen Limes für fixes kleines H die Relation

$$\xi_\infty \;=\; H^{-\nu_c} \lim_{x \to \infty} x^{\nu_c}\, Q_\xi(x) \qquad \text{mit} \qquad x \;=\; H\, L^{\frac{1}{\nu_c}} \tag{5.7}$$

gelten. Die Funktion

$$A_\xi(x) \;=\; x^{\nu_c}\, Q_\xi(x) \tag{5.8}$$

konvergiert also im Limes unendlichen Volumens gegen die kritische Amplitude ξ^c. Trägt man die Funktion $A_\xi(x) = \xi H^{\nu_c}$ gegen $x = HL^{1/\nu_c}$ auf, sollte sich im Idealfall ein Plateau bei ξ^c ergeben. Abbildung 5.13 zeigt dies für die mit dem Fourier-Verfahren bestimmten Korrelationslängen. Es ist zwar jeweils so etwas wie ein Plateau zu erkennen, doch schwanken die Werte gerade für ξ_L ziemlich stark. Da es bei dieser Analyse besonders auf die Werte der Korrelationslängen bei großen Feldern

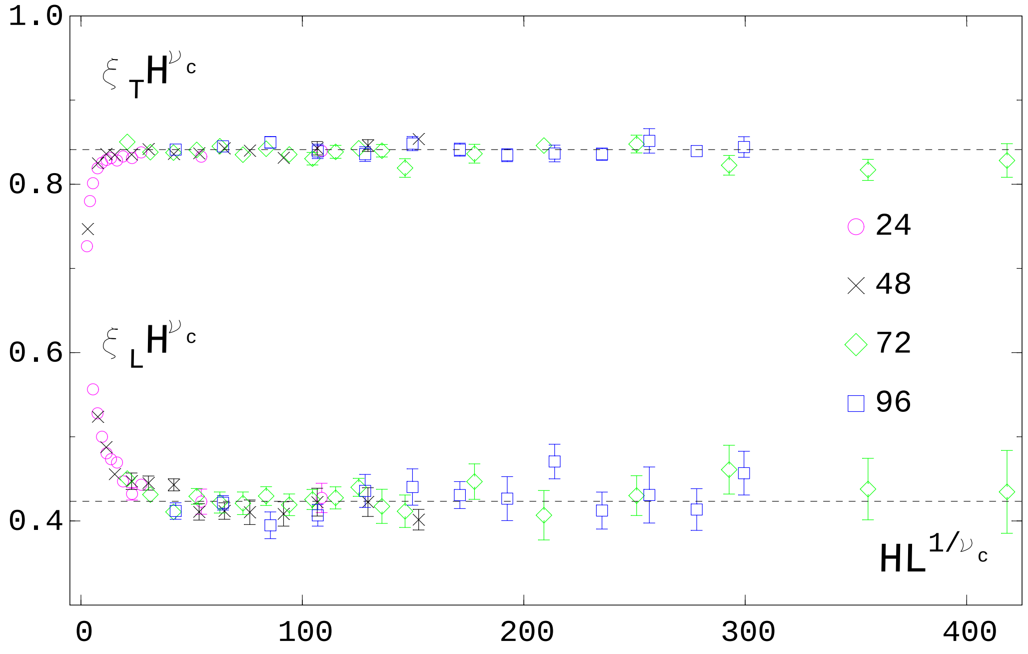


Abbildung 5.13: Die Amplitudenfunktionen der mit dem Fourier-Verfahren bestimmten Korrelationslängen. Die gestrichelten Linien sind die erhaltenen Amplituden $\xi_T^c = 0.8412$ und $\xi_L^c = 0.4233$.

ankommt, sollte die Auswertung mit den durch das Fit-Verfahren ermittelten Werten besser funktionieren. Tatsächlich ergeben sich für ξ_T^{Fit} und ξ_L^{Fit} zwei Plateaus (vgl. Abbildung 5.14). Führt man dann einen Konstanten-Fit durch, erhält man die Amplituden

$$\xi_T^c \;=\; 0.8412(3) \tag{5.9}$$

und

$$\xi_L^c \;=\; 0.4233(3) \tag{5.10}$$

bei allerdings schlechten $\chi^2/dof \approx 10$. Es wurden bei beiden Fits alle Datenpunkte des 72er und des 96er Gitters verwendet, bei der longitudinalen Amplitude aber ohne den Wert bei dem kleinsten Feld für $L = 72$. Die beiden Fit-Ergebnisse (5.9) und (5.10) sind in den Abbildungen 5.13 und 5.14 als gestrichelte Linien eingezeichnet. Die Ergebnisse sind konsistent mit den oben berechneten Amplituden (5.3) und (5.4), und auch das resultierende Amplitudenverhältnis

$$\frac{\xi_T^c}{\xi_L^c} \;=\; 1.9872(16) \tag{5.11}$$

stimmt innerhalb der Fehlergrenzen mit dem oben berechneten (5.5) überein.

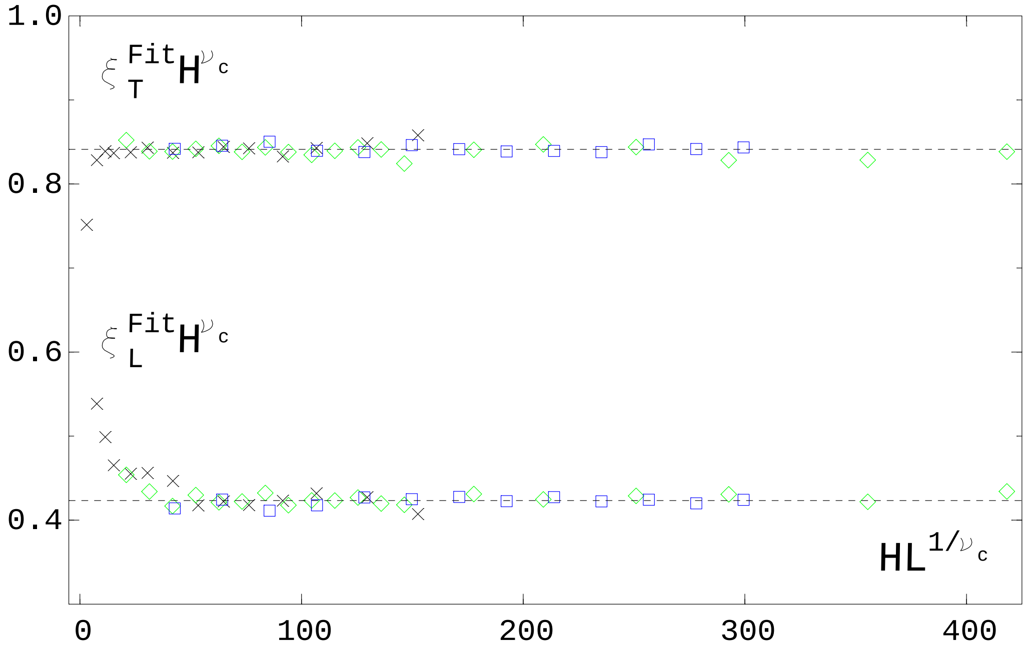


Abbildung 5.14: Die Amplitudenfunktionen der mit dem Fit-Verfahren bestimmten Korrelationslängen. Die gestrichelten Linien sind die erhaltenen Amplituden $\xi_T^c = 0.8412$ und $\xi_L^c = 0.4233$.

Abschließend betrachten wir die Finite-Size-Skalenfunktionen Q_{ξ_T} und Q_{ξ_L}. In der Abbildung 5.15 sind separat für den transversalen (a) und den longitudinalen Anteil (b) ξ/L gegen HL^{1/ν_c} für vier verschiedene Gittergrößen aufgetragen. Pro Gitterlänge wurde mit der Multihistogramm-Methode von Ferrenberg und Swendsen [23, 24] zwischen den Datenpunkten interpoliert. Die leichten Schwankungen in der Skalenfunktion Q_{ξ_L} im Vergleich zu Q_{ξ_T} resultieren aus der geringeren Statistik, und deuten nochmals auf die Schwierigkeiten des Fourier-Verfahrens zur Bestimmung der Korrelationslängen hin, wenn diese klein sind. Dennoch skalieren die Daten auch für große Felder gut, so daß die Annahme, daß im O(4)-Modell die *Corrections to Scaling* vernachlässigbar sind, hier erneut bestätigt wird.

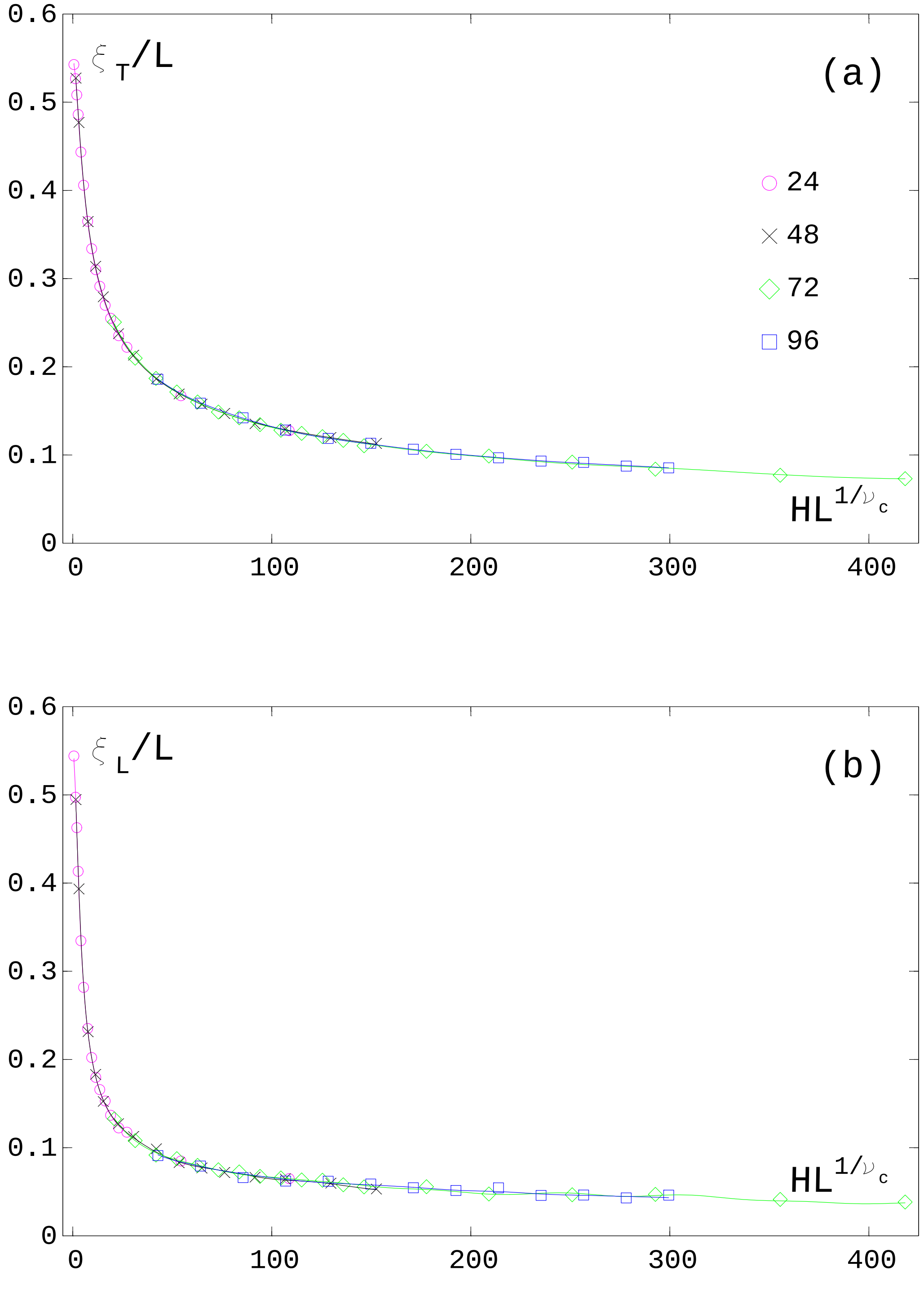


Abbildung 5.15: Die Finite-Size-Skalenfunktionen Q_{ξ_T} (a) und Q_{ξ_L} (b) bei T_c. Die Kurven durch die Datenpunkte wurden für die einzelnen Gitter mit der Multihistogramm-Methode berechnet.

5.3 Verhalten der Korrelationslängen bei $T < T_c$

In der gebrochenen Phase gibt es, wie in Kapitel 3.2 beschrieben, theoretische Vorhersagen für das Verhalten der Korrelationslängen, die hier nun überprüft werden. Wir haben Gitter der Ausdehnung L = 24, 48, 72, 96 und 120 bei der Kopplung $J = 0.95$ und verschiedenen Feldern simuliert. Der jeweilige Simulationsbereich ist in Tabelle 5.4 dargestellt.

L	H
24	0.0005 - 0.04
48	0.0005 - 0.04
72	0.0002 - 0.04
96	0.0002 - 0.0035
120	0.0002 - 0.001

Tabelle 5.4: Simulationsbereiche der einzelnen Gitter bei $J = 0.95$.

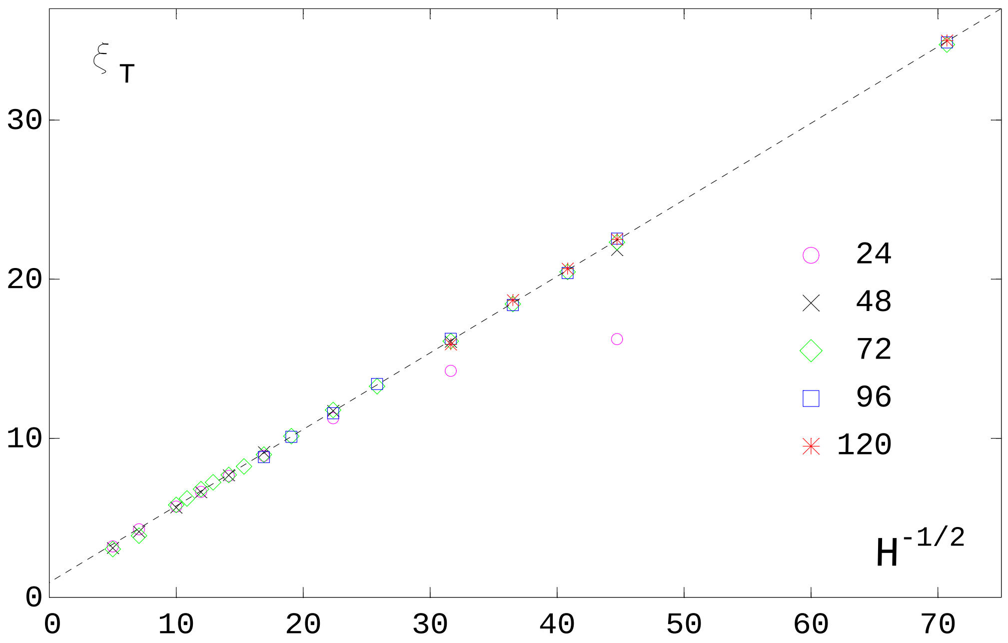


Abbildung 5.16: ξ_T in Abhängigkeit von $H^{-1/2}$ bei $J = 0.95$ für verschiedene Gittergrößen. Die gestrichelte Gerade ist das Fit-Ergebnis $\xi_T(H) = 0.481\, H^{-1/2} + 0.94$.

Für die transversale Korrelationslänge sollte gelten

$$\xi_T \sim H^{-\frac{1}{2}}.$$

Abbildung 5.16, in der ξ_T gegen $H^{-1/2}$ aufgetragen ist, bestätigt diese Vorhersage. Für kleine Felder sind noch Finite-Size-Effekte zu erkennen, doch die Daten der jeweils größten beiden Gitter sind innerhalb der Fehlergrenzen identisch und repräsentieren somit den Limes unendlichen Volumens. Die eingezeichnete Gerade ist das Fit-Ergebnis mit dem Ansatz $\xi_T(H) = aH^{-1/2}+b$. Vernachlässigt man die Werte für große H, bei denen eventuell noch Korrekturen eine Rolle spielen können, liefert der Fit unter Verwendung der Werte des jeweils größten Gitters in dem Bereich $H \leq 0.01$ (enspricht $H^{-1/2} \gtrsim 10$) $a = 0.481(2)$ und $b = 0.94(5)$ mit $\chi^2/dof = 1.1$.
Um nochmals zu demonstrieren, daß mit dem Fit-Verfahren zur Bestimmung der Korrelationslängen die Fehler unterschätzt werden, wird nun das Resultat des Geraden-Fits angegeben, wenn die Werte ξ_T^{Fit} verwendet werden. Auf eine Abbildung, die ξ_T^{Fit} in Abhängigkeit von $H^{-1/2}$ zeigt, wird hier verzichtet, weil sie sich von Abbildung 5.16 nicht unterscheidet, da die Werte ξ_T^{Fit} immer innerhalb der Fehlergrenzen von ξ_T^F liegen. Es verwundert deshalb auch nicht, daß der Geraden-Fit mit $a = 0.4796(5)$ und $b = 0.98(1)$ nahezu die gleichen Ergebnisse wie oben liefert. Das χ^2/dof liegt jetzt aber in der Größenordnung von 19. Eine Erklärung hierfür kann nur der zu kleine Fehler der verwendeten Datenpunkte sein.
Die longitudinale Korrelationslänge verhält sich in der gebrochenen Phase gemäß

$$\xi_L \sim H^{-\frac{1}{4}},$$

wenn $\chi_L \sim \xi_L^2$ ist. Andererseits soll für kleine Felder ein konstanter Faktor (≈ 2) zwischen ξ_L und ξ_T liegen, was natürlich nur möglich ist, wenn dort für beide Korrelationslängen dieselbe H-Abhängigkeit gilt. Da nicht bekannt ist, in welchem Bereich des äußeren Feldes welche Vorhersage gilt, haben wir ξ_L gegen $H^{-1/4}$ (Abbildung 5.17) und gegen $H^{-1/2}$ (Abbildung 5.18) aufgetragen. Doch keines der beiden Bilder läßt eine eindeutige Aussage zu, denn durch die großen Fehler und die Schwankungen der Punkte könnte man in beiden Fällen ein lineares Verhalten vermuten.
Da aber die Korrelationslänge nicht zu groß ist, können hier auch die Daten, die mit dem Fit-Verfahren ermittelt wurden, herangezogen werden. Die Abbildungen 5.19 und 5.20 zeigen ξ_L^{Fit} als Funktion von $H^{-1/4}$ bzw. $H^{-1/2}$. Hier wird, abgesehen von den kleinsten Feldern, wo noch starke Finite-Size-Effekte zu sehen sind, das Verhalten $\xi_L \sim H^{-1/4}$ bestätigt, da in Abbildung 5.19 die Punkte auf einer Geraden zu liegen scheinen. Die gestrichelte Gerade ist das Ergebnis eines Geraden-Fits mit den Werten des jeweils größten Gitters im Bereich $0.001 \leq H \leq 0.01$ (enspricht $3 \lesssim H^{-1/4} \lesssim 6$). Der Fit mit dem Ansatz $\xi_L(H) = aH^{-1/4} + b$ liefert $a = 1.27(1)$ und $b = -1.43(4)$, wobei das χ^2/dof mit einem Wert von ca. 14 zwar relativ groß ist, was aber hauptsächlich wieder auf die unterschätzten Fehler der verwendeten Werte ξ_L^{Fit} zurückzuführen ist. Das Resultat dieses Fits ist auch in Abbildung 5.20 eigezeichnet und stimmt gut mit den Punkten überein.

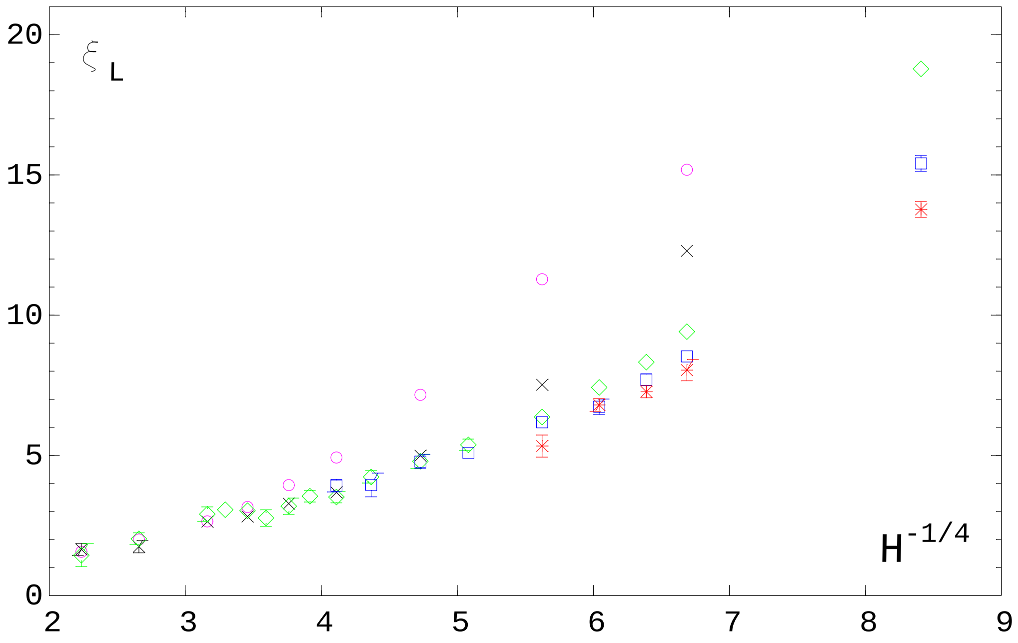


Abbildung 5.17: ξ_L^F in Abhängigkeit von $H^{-1/4}$ bei $J = 0.95$.

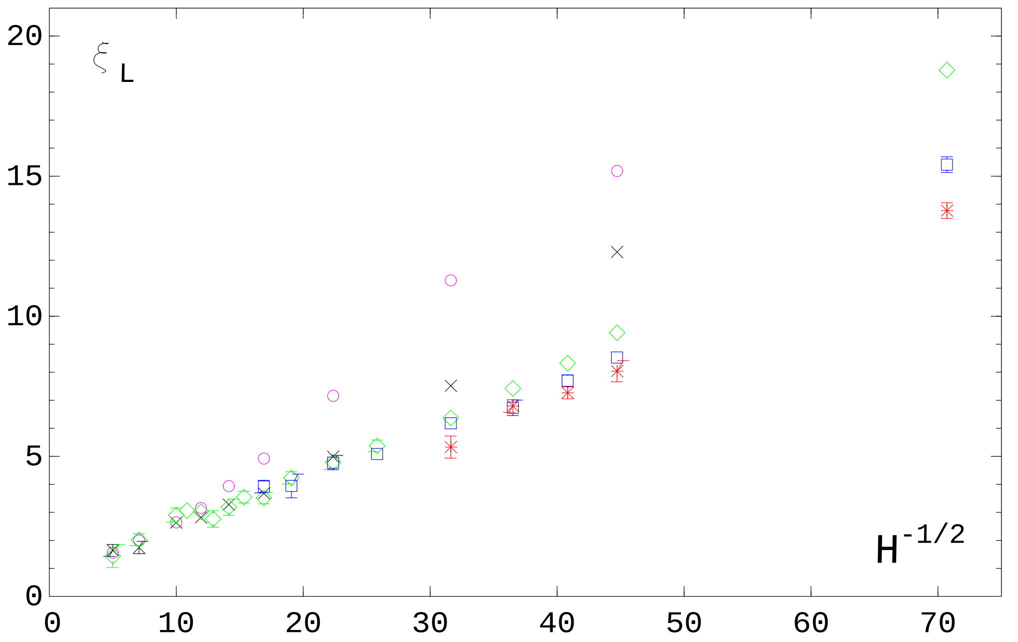


Abbildung 5.18: ξ_L^F in Abhängigkeit von $H^{-1/2}$ bei $J = 0.95$.

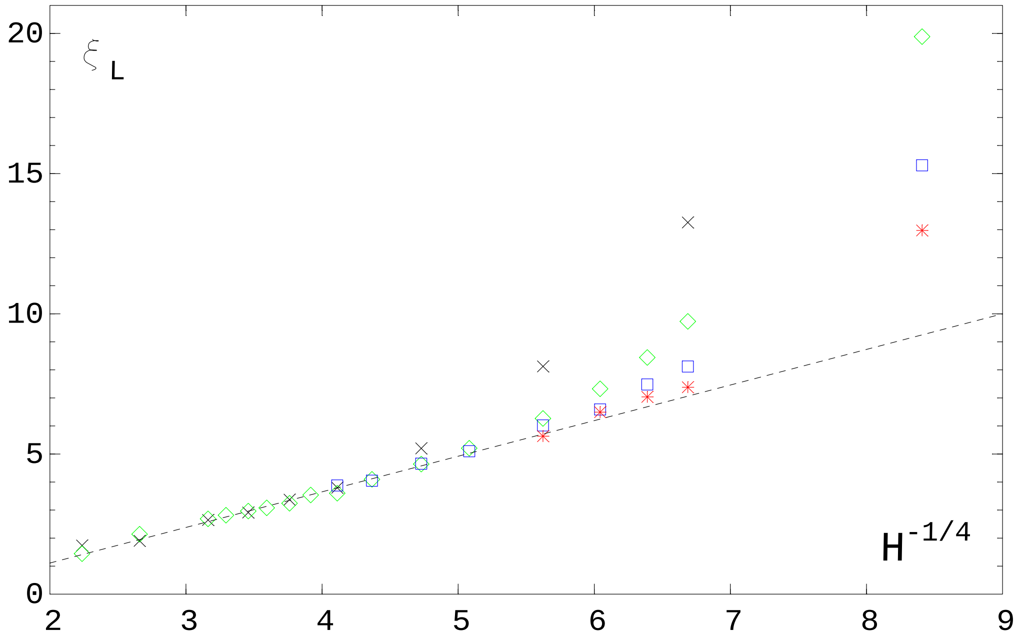


Abbildung 5.19: ξ_L^{Fit} in Abhängigkeit von $H^{-1/4}$ bei $J = 0.95$. Die gestrichelte Gerade ist das Fit-Ergebnis $\xi_L(H) = 1.27\,H^{-1/4} - 1.43$.

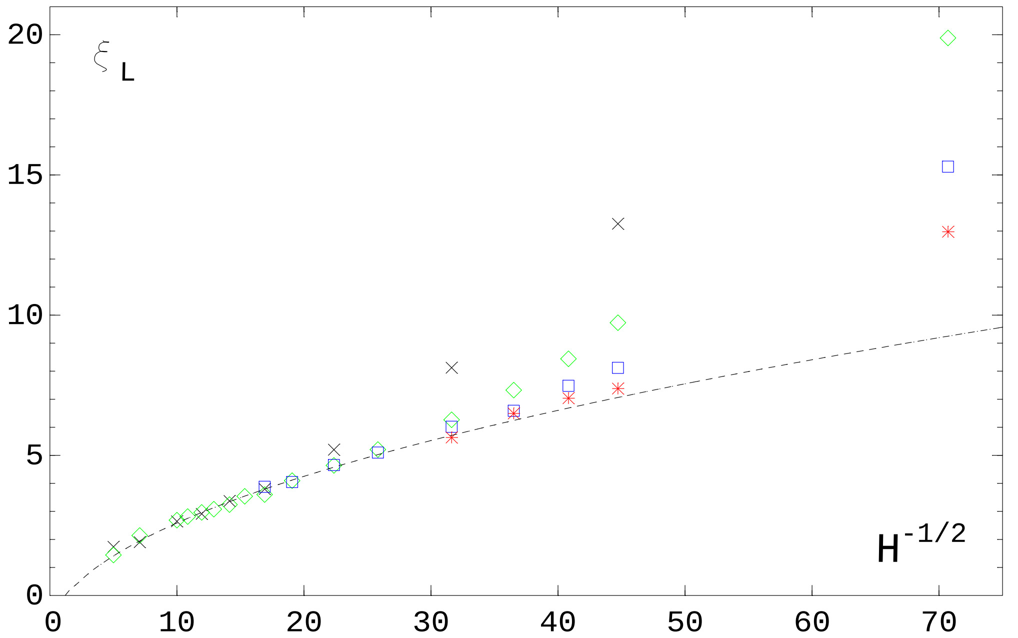


Abbildung 5.20: ξ_L^{Fit} in Abhängigkeit von $H^{-1/2}$ bei $J = 0.95$. Die gestrichelte Linie ist das obige Fit-Ergebnis.

Die Vorhersage $2\xi_L \approx \xi_T$, die für sehr kleine Felder gelten könnte, kann mit den vorliegenden Daten nicht bestätigt werden. Selbst für die kleinen Felder, wo aufgrund starker Finite-Size-Effekte auch nicht mehr das Verhalten $\xi_L \sim H^{-1/4}$ bestätigt werden kann, läßt sich kein konstanter Faktor zwischen den beiden Korrelationslängen finden, und außerdem scheint das Verhältnis auch eher größer als zwei zu sein.
Dennoch wäre es jetzt durchaus interessant, zumindest die Gleichung (3.52)

$$G_L(\mathbf{x}) \;=\; \frac{N-1}{2\,M^2}\, G_T^2(\mathbf{x})$$

für die kleinen Felder zu überprüfen. Da wir aber nicht diese Korrelationsfunktionen, sondern die mit Hilfe von Ebenenspins ermittelten $\bar{G}_L(\tau)$ und $\bar{G}_T(\tau)$ berechnet haben, ist diese Überprüfung mit unseren Daten leider nicht möglich. Es läßt sich keine entsprechende Relation für die Zweiebenen-Korrelationsfunktionen finden, da die transversale Zweipunkt-Korrelationsfunktion quadratisch in die Gleichung eingeht.

5.4 Verhalten der Korrelationslängen bei $T > T_c$

In der symmetrischen Phase muß für verschwindendes äußeres Feld $\xi_L = \xi_T$ gelten, doch bei $H > 0$ sollte sich auch hier ein Unterschied in der longitudinalen und transversalen Korrelationslänge ergeben.
Abbildung (5.21) stellt ξ_L und ξ_T in Abhängigkeit von H bei $J = 0.92$ für ein Gitter der Länge $L = 48$ dar. Zur besseren Veranschaulichung des Verhaltens der Korrelationslängen sind die Datenpunkte jeweils mit einem Spline verbunden, wobei bei der longitudinalen allerdings ein Punkt ausgelassen wurde. Auffällig ist einerseits das raschere Sinken von ξ_L gegenüber ξ_T bei kleinen Feldern, andererseits scheinen für große H die beiden Korrelationslängen gleich schnell abzufallen, was die Vermutung nahe legt, daß es sich hierbei um ein universelles Verhalten der Korrelationslängen in der symmetrischen Phase handelt. Einige Tests haben ergeben, daß für eine größere Kopplung der Bereich des identischen Verhaltens von ξ_L und ξ_T noch größer ist, so daß wir bei $J = 0.93$ eine genauere Analyse durchgeführt haben. Wegen einer

L	H
24	0.0005 - 0.05
48	0.00035 - 0.05
72	0.0004 - 0.01
96	0.00075 - 0.00125

Tabelle 5.5: Simulationsbereiche der einzelnen Gitter bei $J = 0.93$.

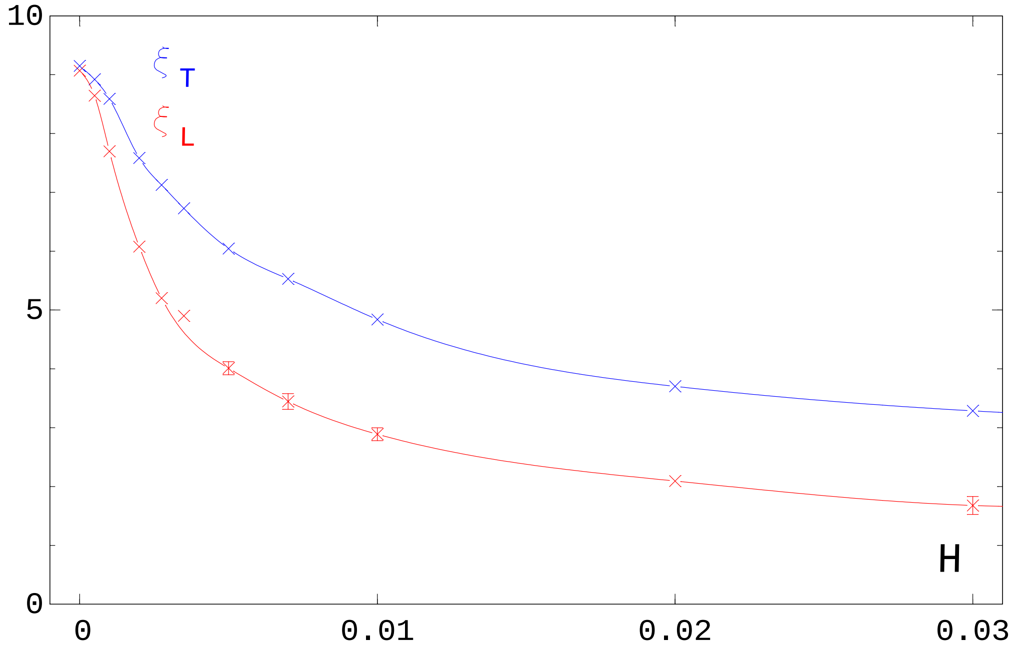


Abbildung 5.21: ξ_L und ξ_T in Abhängigkeit von H bei $J = 0.92$ für $L = 48$. Die Punkte sind jeweils mit einem Spline verbunden.

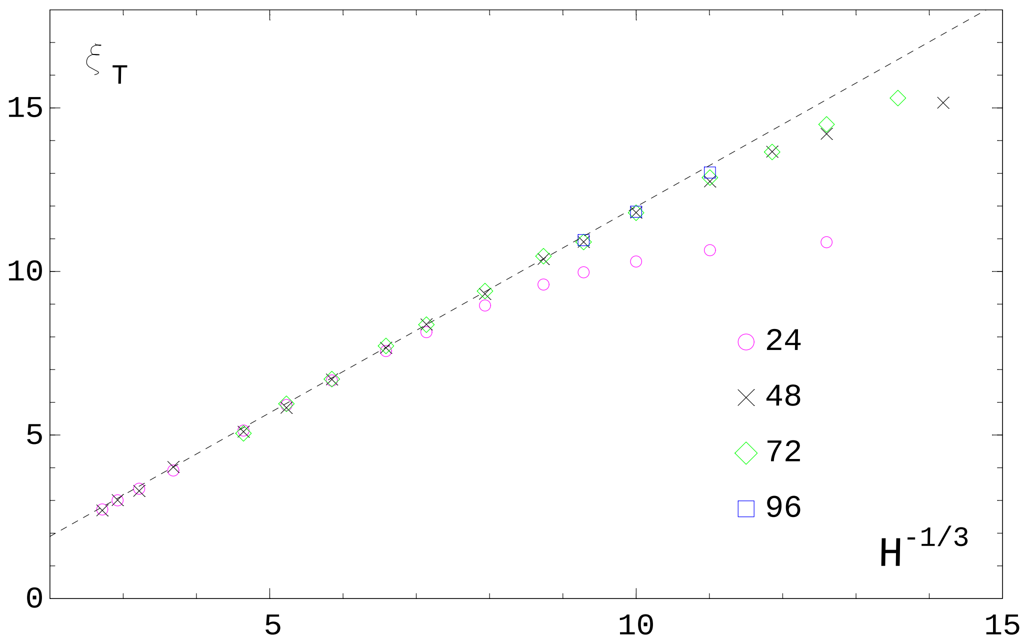


Abbildung 5.22: ξ_T in Abhängigkeit von $H^{-1/3}$ bei $J = 0.93$. Die gestrichelte Gerade ist das Fit-Ergebnis $\xi_T(H) = 1.26\,H^{-1/3} - 0.62$.

Bemerkung von E. Brezin und J. Zinn-Justin in [25] haben wir die Abhängigkeit der Korrelationslängen von $H^{-1/d}$ getestet.
In den Abbildungen 5.22, 5.23 und 5.24 sind ξ_T und ξ_L bzw. ξ_L^{Fit} gegen $H^{-1/3}$ für verschiedene Gittergrößen aufgetragen. Der jeweilige Variationsbereich des äußeren Feldes pro L ist in Tabelle 5.5 aufgeführt. Zusätzlich ist jeweils das Ergebnis eines Geraden-Fits mit dem Ansatz $\xi_{L,T}(H) = aH^{-1/3} + b$ eingezeichnet. Für diese Fits konnten jeweils nicht alle vorliegenden Datenpunkte verwendet werden, da die $H^{-1/3}$-Abhängigkeit für sehr große H möglicherweise nicht mehr gilt, und außerdem für sehr kleine H die beiden Korrelationslängen gegen denselben Wert konvergieren und so dort von dem vermuteten Verhalten abweichen. Dies macht es schwierig, den Bereich, in dem $\xi_{L,T} \sim H^{-1/3}$ ist, abzuschätzen. Zusätzlich ist bei der Wahl des Fit-Intervalls auf die auftretenden Finite-Size-Effekte zu achten.
Für die transversale Korrelationslänge wurden die Datenpunkte des jeweils größten Gitters im H-Intervall [0.001,0.02] (entspricht $3.5 \lesssim H^{-1/3} \lesssim 10$) verwendet. Der Fit liefert dann das Ergebnis $a = 1.26(1)$ und $b = -0.62(9)$ ($\chi^2/dof = 1.1$). In Abbildung 5.22 ist deutlich zu erkennen, daß für $H < 0.0015$ ($H^{-1/3} \gtrsim 9$) die Datenpunkte beginnen, vom linearen Verhalten nach unten abzuweichen.
Ähnliches läßt sich auch für die longitudinale Korrelationslänge sagen, jedoch weichen hier die Punkte bei kleinen Feldern nach oben ab. Ein Geraden-Fit mit den über das Fourier-Verfahren bestimmten Werten erweist sich hier als schwieriger, denn, wie in Abbildung 5.23 zu erkennen, schwanken die Datenpunkte ziemlich stark. Wir haben uns deshalb dazu entschlossen, hier die Werte ξ_L^{Fit} (vgl. Abbildung 5.24) zu verwenden. Mit dem Fit mit den Punkten des jeweils größten Gitters im H-Intervall [0.0015,0.02] (entspricht $3.5 \lesssim H^{-1/3} \lesssim 9$) ergibt sich dann $a = 0.813(6)$ und $b = -0.96$ ($\chi^2/dof = 13.2$). Das schlechte χ^2/dof ist wieder auf die Unterschätzung der Fehler von ξ_L^{Fit} zurückzuführen.
Abschließend läßt sich sagen, daß für nicht allzu kleine Felder ($H \geq 0.0015$) das Verhalten $\xi_{L,T} \sim H^{-1/3}$ beobachtet werden kann.

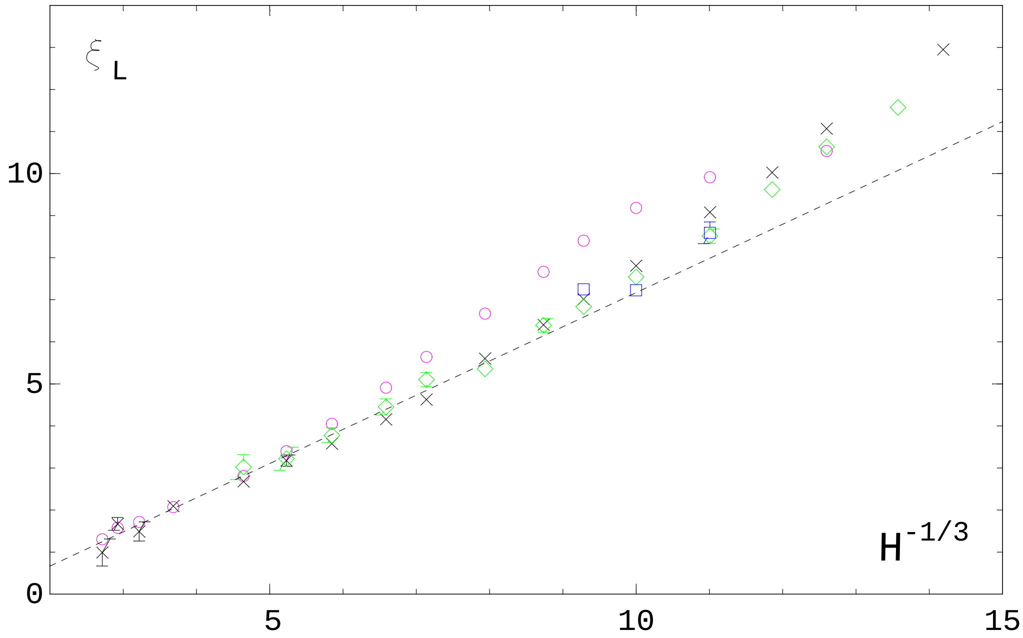


Abbildung 5.23: ξ_L in Abhängigkeit von $H^{-1/3}$ bei $J = 0.93$. Die gestrichelte Gerade ist das Fit-Ergebnis $\xi_L(H) = 0.813\, H^{-1/3} - 0.96$.

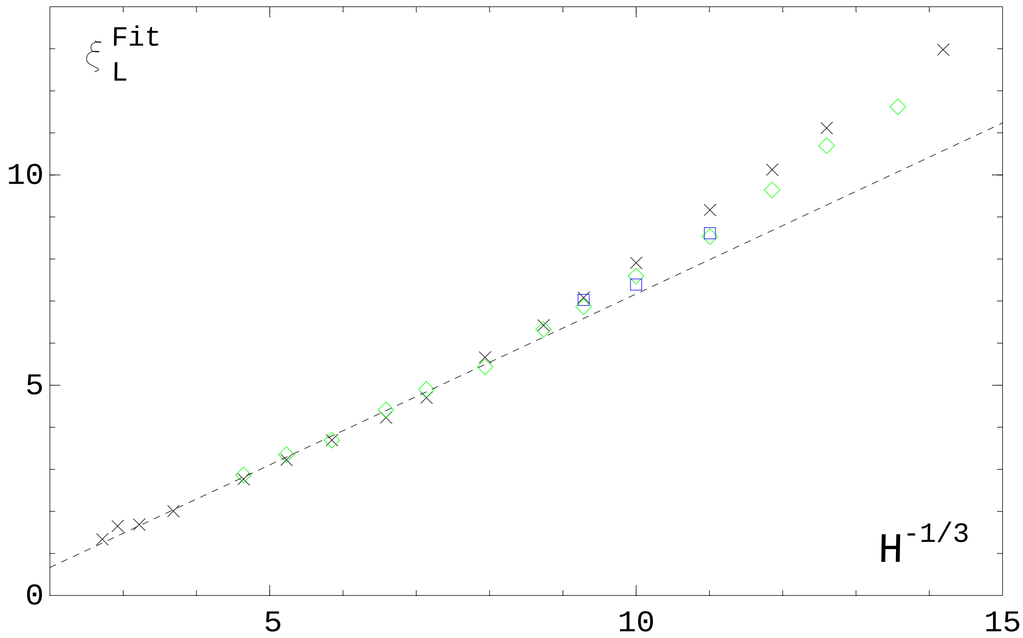


Abbildung 5.24: ξ_L^{Fit} in Abhängigkeit von $H^{-1/3}$ bei $J = 0.93$. Die gestrichelte Gerade ist das Fit-Ergebnis $\xi_L(H) = 0.813\, H^{-1/3} - 0.96$.

5.5 Die Skalenfunktionen g_ξ^T und g_ξ^L der Korrelationslängen

Nachdem wir das Verhalten der Korrelationslängen am kritischen Punkt, in der gebrochenen und in der symmetrischen Phase untersucht haben, wollen wir nun die O(4)-Skalenfunktionen g_ξ^T und g_ξ^L der Korrelationslängen für die entsprechende Universalitätsklasse bestimmen.
Die Zustandsgleichung (2.28) der Korrelationslänge ist gegeben durch

$$\xi(t,h) \;=\; (c_h\, h)^{-\frac{1}{y_h}}\; \Psi_2\left(c_t\, c_h^{-\frac{y_t}{y_h}}\, t\, h^{-\frac{y_t}{y_h}}\right)$$

mit einer Skalenfunktion Ψ_2. Mit den entsprechenden Exponenten (2.29) und den Skalenrelationen (2.8) folgt daraus

$$\begin{aligned} \xi(t,h) &= h^{-\nu_c}\, g_\xi(t h^{-\frac{1}{\beta\delta}}) \\ &= h^{-\nu_c}\, g_\xi(z) \end{aligned} \tag{5.12}$$

mit einer weiteren Skalenfunktion g_ξ und der Definition

$$z \;=\; t h^{-\frac{1}{\beta\delta}}. \tag{5.13}$$

Wir verwenden hier das normierte Feld h, weil so die Skalenfunktion g_ξ der Korrelationslänge die gleiche, allgemein übliche Normierung wie die Zustandsgleichung $f_G(z)$ der Magnetisierung besitzt.
Da sich die transversale und die longitudinale Korrelationslänge aufgrund des Goldstone-Effektes unterschiedlich verhalten, erwartet man auch verschiedene Skalenfunktionen g_ξ^T und g_ξ^L. Bisher wurden diesbezüglich für das O(4)-Modell noch keine Untersuchungen durchgeführt, und es gibt bislang keine theoretischen Vorhersagen zu dem Verlauf dieser Funktionen.

In der gebrochenen Phase haben wir das System bei fünf verschiedenen Kopplungen (J = 1.2, 1.0, 0.975, 0.95, 0.94) und in der symmetrischen bei vier verschiedenen Kopplungen (J = 0.93, 0.92, 0.91, 0.9) auf unterschiedlich großen Gittern simuliert. Das Feld wurde dabei jeweils zwischen $H = 0.0005$ und $H = 0.01$ in kleinen Abständen variiert, so daß in diesem Bereich die meisten Datenpunkte vorliegen. Bei vielen Kopplungen wurde aber zusätzlich noch bei größeren bzw. kleineren Feldern simuliert. Die Tabelle 5.6 gibt den ganzen Variationsbereich des Feldes sowie die Anzahl der einzelnen Meßpunkte in dem jeweiligen H-Intervall an. Für $J = 0.95$, $J = 0.93$ und die kritische Kopplung $J_c = 0.9359$ liegen die meisten Datenpunkte vor, da hier die in den vorigen Kapiteln beschriebenen Analysen durchgeführt wurden.

J	H	$\#N$
0.9	0.0005 - 0.05	11
0.91	0.0005 - 0.01	8
0.92	0.0005 - 0.05	12
0.93	0.00035 - 0.05	18
0.9359	0.0005 - 0.04	21
0.94	0.0001 - 0.005	8
0.95	0.0002 - 0.04	18
0.975	0.0005 - 0.01	9
1.0	0.0005 - 0.04	15
1.2	0.0005 - 0.04	9

Tabelle 5.6: Variationsbereiche des äußeren Feldes bei den einzelnen Kopplungen. $\#N$ gibt die Anzahl der Meßpunkte im jeweiligen H-Intervall an.

Gleichung (5.12) gilt nur in der Nähe des kritischen Punktes für $H \to 0$. Es ist bisher nicht bekannt, wie groß dieser kritische Bereich ist, d. h., für welche Parameterpaare (J, H) die Datenpunkte ohne erkennbare Abweichungen skalieren. Deshalb verwenden wir zunächst alle Meßpunkte (für $L \geq 48$), um einen ersten Eindruck vom Verlauf der Kurven zu erhalten. Da auch viele Werte bei relativ großen Feldern und somit kleinen Korrelationslängen vorliegen, werden hierfür die bei kleinem ξ etwas stabileren Resultate ξ^{Fit} verwendet. Für die transversale Korrelationslänge macht es überhaupt keinen Unterschied, ob die mit dem Fourier-Verfahren oder dem Fit-Verfahren bestimmten Werte benutzt werden, und für die longitudinale Korrelationslänge liefern beide Verfahren nur in seltenen Fällen ($T < T_c, H \gtrsim 0$, wenn $\xi_L \gtrsim 10$ ist) leicht verschiedene Resultate.
Abbildung 5.25 zeigt $\xi_T^{Fit} h^{\nu_c}$ als Funktion von z mit allen Datenpunkten und läßt den Verlauf von g_ξ^T schon gut erkennen. Der einzelne Punkt bei $z = 0$ ist das Resultat (5.9) der Amplitude ξ_T^c für den kritischen Punkt, und jeder anderen Kopplung entspricht eine Farbe. Dabei gehört der von $z = 0$ am weitesten entfernte Datenpunkt zu dem kleinsten Feld, und mit wachsendem H nähern sich die Punkte der gepunkteten Linie. Für die transversale Korrelationslänge sind nahezu keine Finite-Size-Effekte sichtbar. Die Werte der Kopplung $J = 1.2$ liegen eindeutig nicht in dem Bereich, in dem das Verhalten mit einer Funktion ohne Korrektur beschrieben werden kann. Bei genauerer Betrachtung läßt sich erkennen, daß auch die Kopplung $J = 1.0$ allem Anschein nach noch außerhalb dieses Bereiches liegt, da alle Werte bei dieser Kopplung im Vergleich zu den anderen etwas zu hoch sind. Außerdem skalieren die Daten allgemein für die jeweils größten Felder nicht mehr, denn für wachsendes H ist ebenfalls eine (leichte) Abweichung nach oben zu beobachten. Diese Abweichung beginnt bei allen Kopplungen sowohl in der gebrochenen als auch in der symmetrischen Phase bei Feldern $H > 0.005$.
Die Abbildung 5.26 zeigt als Endergebnis den Verlauf der Skalenfunktion g_ξ^T unter

Verwendung der Daten für die jeweils größten Gitter ohne die Kopplungen $J = 1.2$ und 1.0 und ohne Felder $H > 0.005$.
Die Skalenfunktion g_ξ^L ist wesentlich schwieriger zu bestimmen, wie die Abbildung 5.27, in der $\xi_L^{Fit} h^{\nu_c}$ gegen z für alle Daten aufgetragen ist, besonders deutlich macht. Als nahezu einziger relativ exakt bestimmter Punkt liegt nur das Resultat (5.10) der Amplitude ξ_L^c für $z = 0$ vor. Im Gegensatz zu ξ_T sind für ξ_L noch sehr starke Finite-Size-Effekte vor allem für $J > J_c$ bei kleinen Feldern zu erkennen, und auch die Abweichung vom Skalenverhalten bei großen Feldern ist stärker ausgeprägt. Auf den ersten Blick fällt es schwer, einen Bereich anzugeben, in dem die Daten gut skalieren, aber wir haben durch die obige Analyse von g_ξ^T einen Anhaltspunkt.
Wenn man auch hier die Kopplungen $J = 1.2$ und 1.0 sowie generell Felder $H > 0.005$ nicht berücksichtigt und nur die Datenpunkte der jeweils größten Gitter verwendet, ergibt sich für g_ξ^L der Verlauf in Abbildung 5.28. Die Punkte bei $z < -1.5$ sollten dabei aber nicht weiter betrachtet werden, da sie noch nicht dem Limes unendlichen Volumens entsprechen. Die verbleibenden Punkte ($z > -1.5$) deuten dann den Verlauf der Skalenfunktion g_ξ^L an, wobei die Punkte im Gegensatz zu ξ_T noch stark schwanken. Hierbei darf man aber auch nicht vergessen, daß die Statistik für ξ_T aufgrund der drei transversalen Spinkomponenten gegenüber nur einer longitudinalen dreimal so groß wie für ξ_L ist. Außerdem ist die senkrechte Achse in Abbildung 5.28 gegenüber 5.26 gestreckt, was die Fluktuationen größer erscheinen läßt. Bei Verwendung von ξ_L^F anstatt ξ_L^{Fit} ergibt sich übrigens im Bereich $z > -1.5$ genau dasselbe Bild, allerdings mit wesentlich größeren Fehlern (vgl. Abbildung 5.29). Die Punkte, bei denen das Fourier-Verfahren und das Fit-Verfahren leicht verschiedene Werte liefern, sind aufgrund auftretender Finite-Size-Effekte nicht in diesem Skalenbereich enthalten.
Allgemein läßt sich sagen, um ein ähnlich gutes Ergebnis für g_ξ^L wie für g_ξ^T zu erhalten, müßte einerseits die Statistik erhöht und andererseits auf größeren Gittern simuliert werden, um auch im Bereich $z < -1.5$ brauchbare Werte vorliegen zu haben. Dennoch liefert der Verlauf der Funktion g_ξ^L in dem Bereich $-1.5 < z < 0$ nochmals eine Bestätigung des Ergebnisses $\xi_L \sim H^{-1/4}$ für $J > J_c$ aus Kapitel 5.3. Denn für $\xi_L \sim H^{-1/2}$ sollte die Funktion g_ξ^L (wegen $\nu_c = 0.4019$) in diesem Intervall für $H \to 0$, d. h. $z \to -\infty$, steigen und nicht fallen.

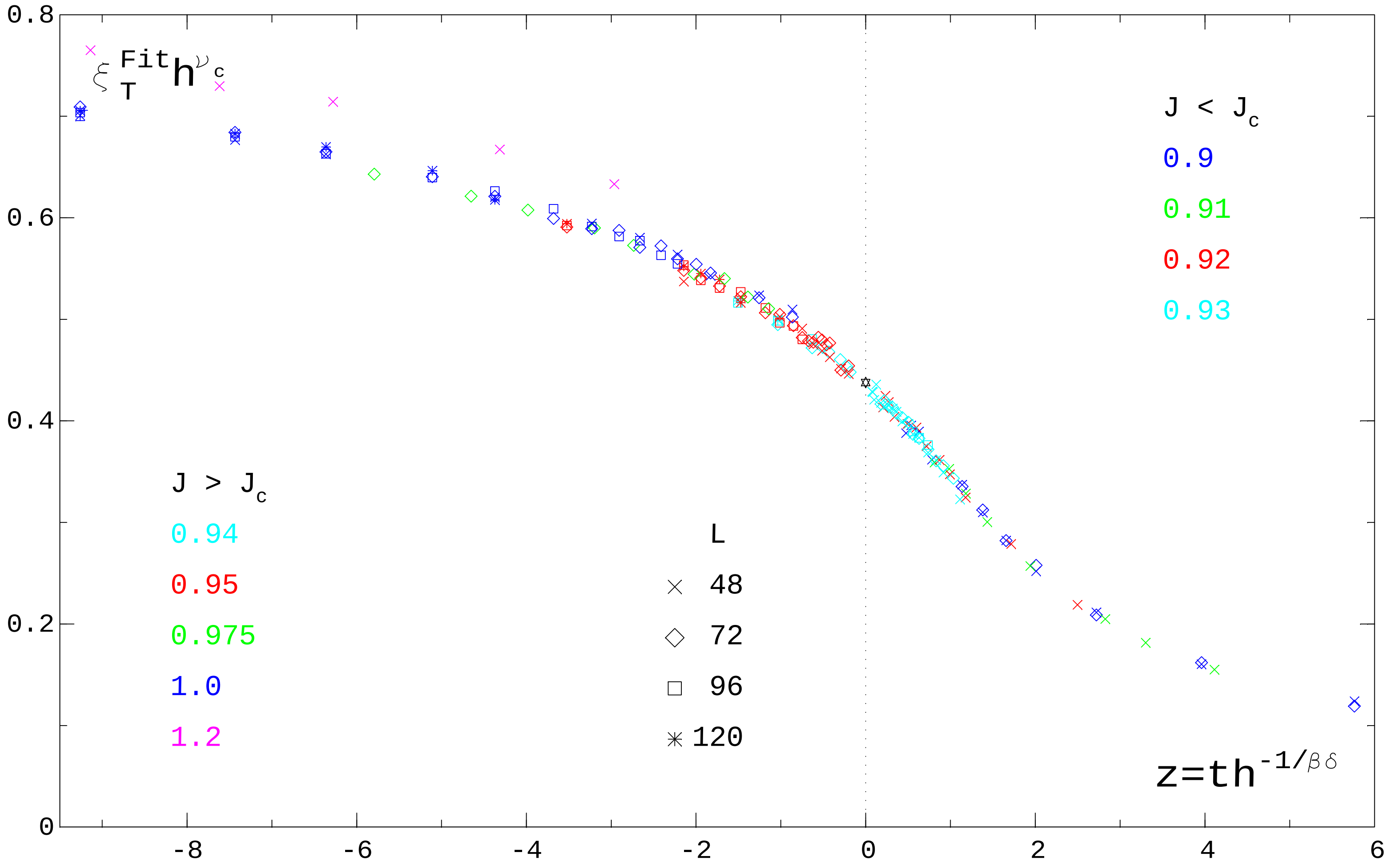


Abbildung 5.25: Die Skalenfunktion g_ξ^T. Eingezeichnet sind alle Datenpunkte für die Gittergrößen $L = 48, 72, 96$ und 120 bei neun verschiedenen Kopplungen J und allen Feldern aus Tabelle 5.6 sowie das Ergebnis $\xi_T^c\, H_0^{-\nu_c} = 0.4377$ bei $z = 0$.

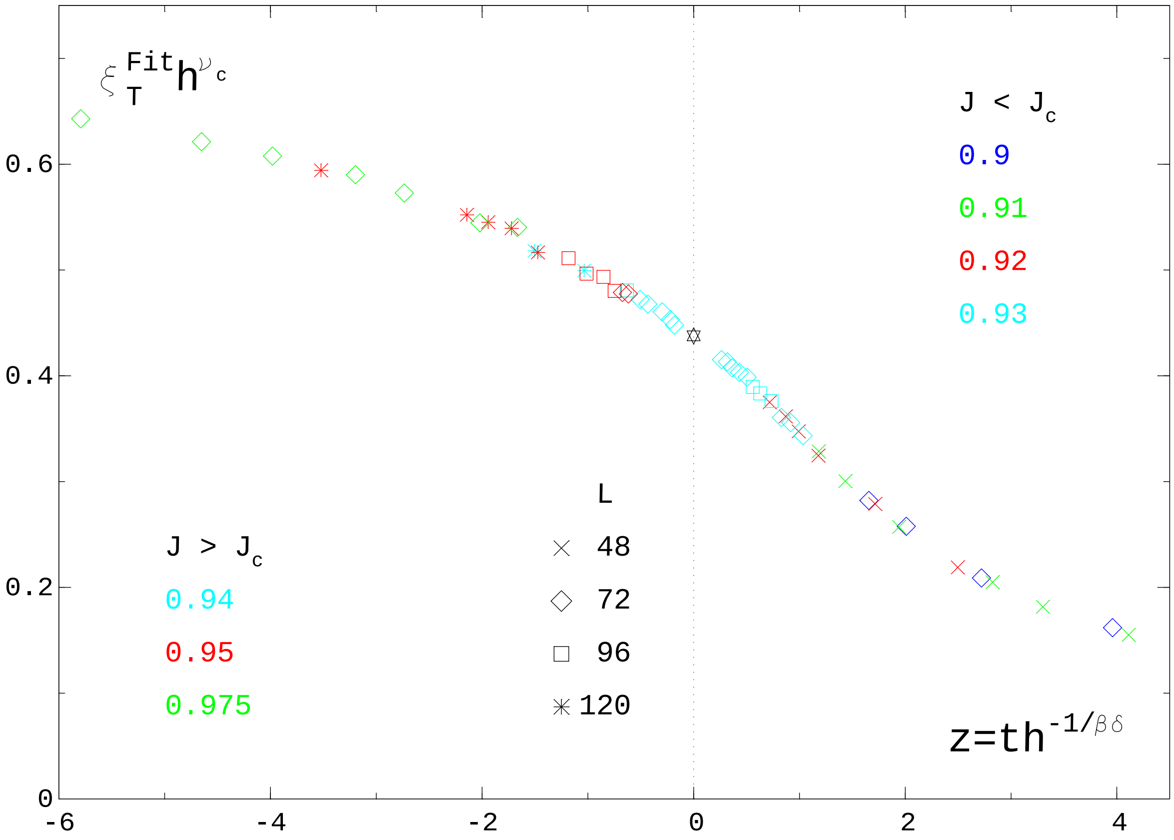


Abbildung 5.26: Die Skalenfunktion g_ξ^T. Eingezeichnet sind nur die Datenpunkte für die jeweils größten Gitter bei sieben verschiedenen Kopplungen J und den Feldern $H \leq 0.005$ sowie das Ergebnis $\xi_T^c H_0^{-\nu_c} = 0.4377$ bei $z = 0$.

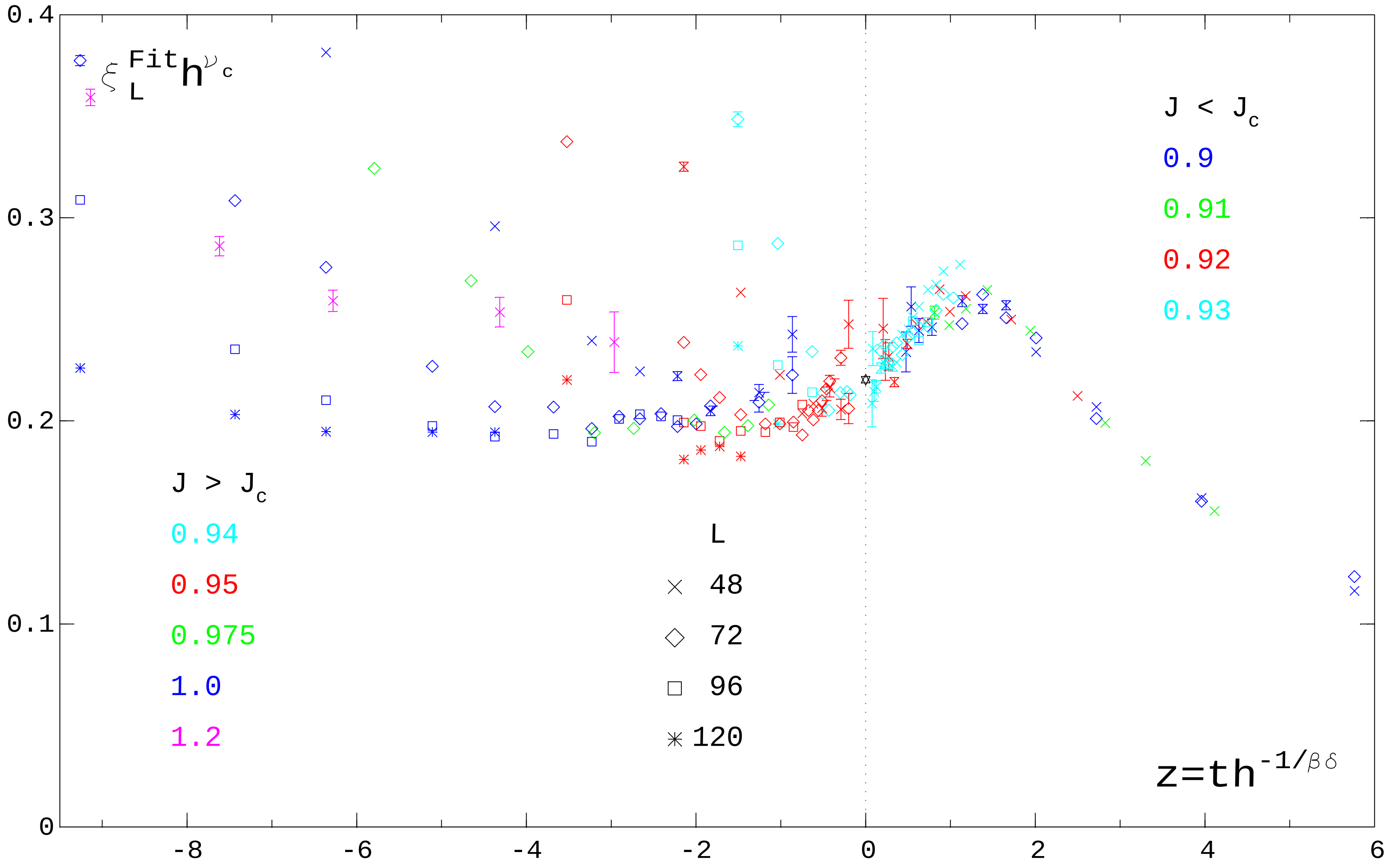


Abbildung 5.27: Die Skalenfunktion g_ξ^L. Eingezeichnet sind alle Datenpunkte für die Gittergrößen $L = 48, 72, 96$ und 120 bei neun verschiedenen Kopplungen J und allen Feldern aus Tabelle 5.6 sowie das Ergebnis $\xi_L^c\, H_0^{-\nu_c} = 0.2203$ bei $z = 0$.

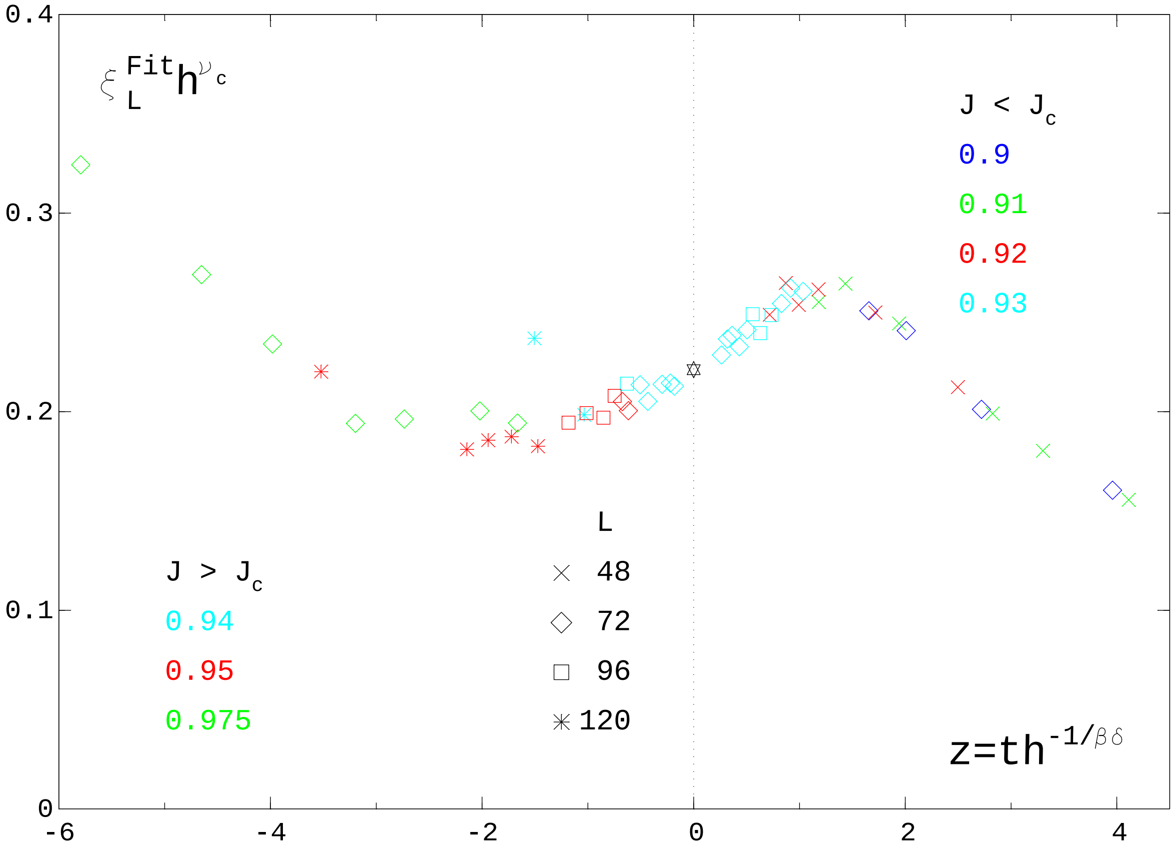


Abbildung 5.28: Die Skalenfunktion g_ξ^L. Eingezeichnet sind nur die Datenpunkte für die jeweils größten Gitter bei sieben verschiedenen Kopplungen J und den Feldern $H \leq 0.005$ sowie das Ergebnis $\xi_L^c\, H_0^{-\nu_c} = 0.2203$ bei $z = 0$.

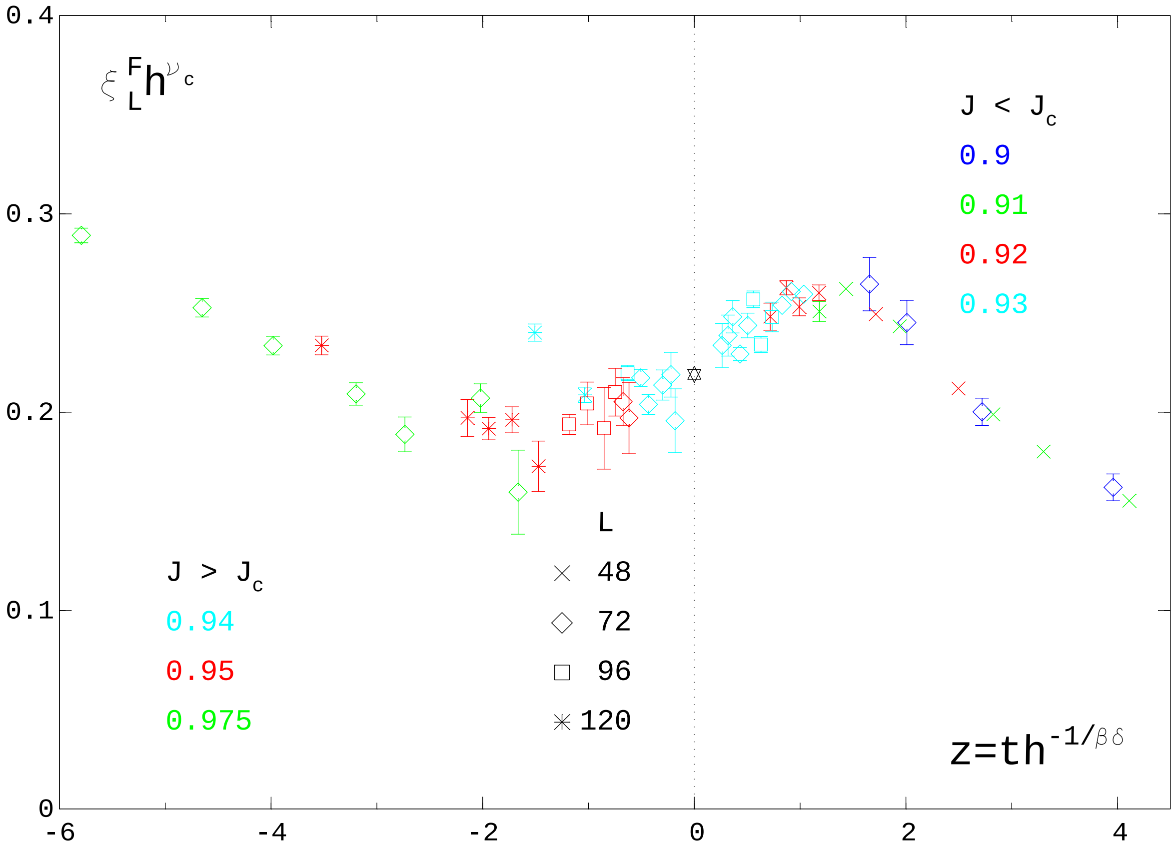


Abbildung 5.29: Die Skalenfunktion g_ξ^L mit den Werten ξ_L^F. Eingezeichnet sind nur die Datenpunkte für die jeweils größten Gitter bei sieben verschiedenen Kopplungen J und den Feldern $H \leq 0.005$ sowie das Ergebnis $\xi_L^c\, H_0^{-\nu_c} = 0.2212$ bei $z = 0$.

Abschließend soll die Skalenfunktion g_ξ^L des O(4)-Modells mit der Skalenfunktion g_ξ des dreidimensionalen Isingmodells mit verbesserter Wirkung verglichen werden. In Abbildung 5.30 ist die Funktion g_ξ des Isingmodells aus [5], bei dem die Spins nur einen Freiheitsgrad und deshalb keine transversalen Komponenten haben, dargestellt. Der generelle Verlauf dieser Funktion ist ähnlich dem von g_ξ^L, doch besonders im Bereich $z < 0$ fällt ein gravierender Unterschied auf. Während die Korrelationslängen des O(4)-Spinmodells in der gebrochenen Phase für $H \to 0$ divergieren, bleibt die Korrelationslänge des Isingmodells in diesem Grenzfall stets endlich. Demnach fällt die Skalenfunktion g_ξ des Isingmodells für $z \to -\infty$ viel schneller auf null ab als g_ξ^L des O(4)-Modells.

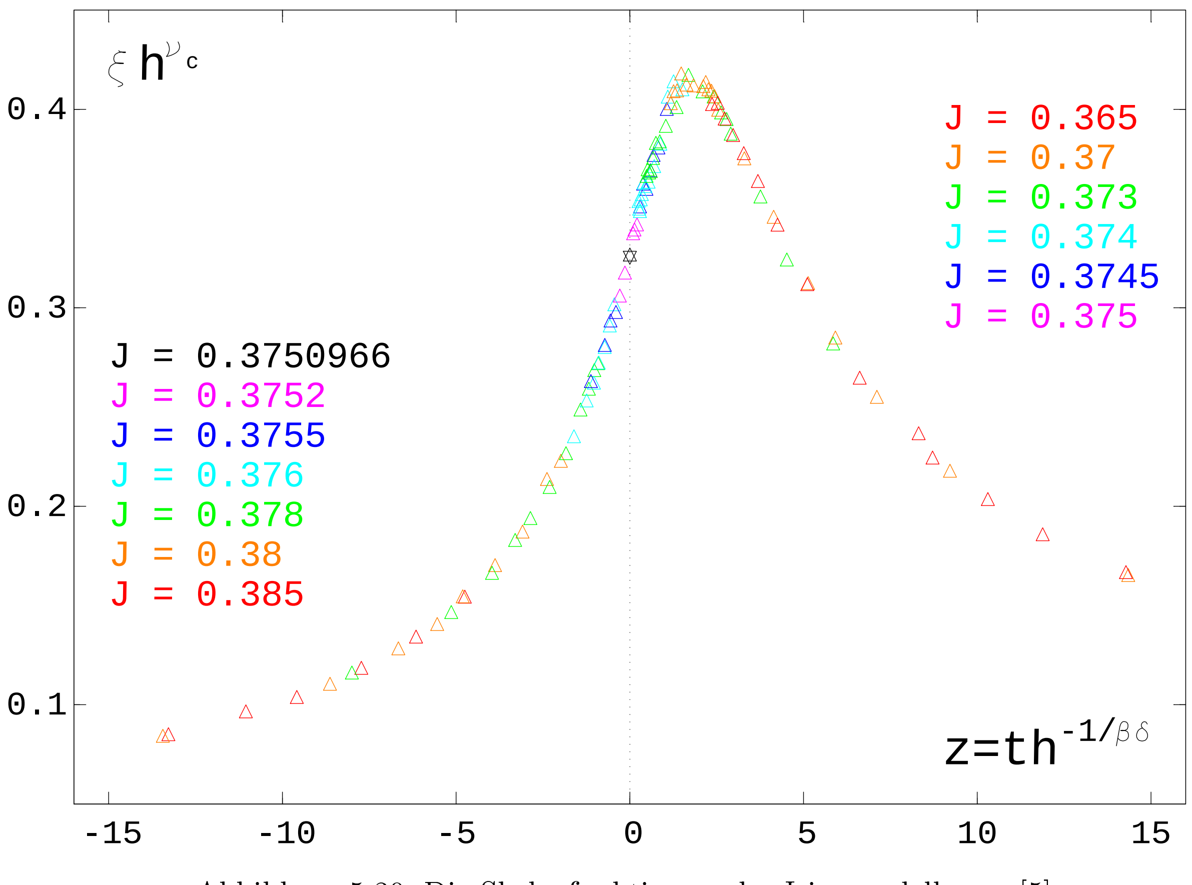


Abbildung 5.30: Die Skalenfunktion g_ξ des Isingmodells aus [5].

Zusammenfassung

In dieser Arbeit wurde das dreidimensionale O(4)-Spinmodell in Abhängigkeit von der Kopplung J und dem äußeren Feld H auf einem kubischen Gitter mit periodischen Randbedingungen simuliert. Es wurden drei verschiedene Verfahren zur Bestimmung der Korrelationslängen getestet und miteinander verglichen. Mit dem Ziel, die theoretischen Vorhersagen zu überprüfen, wurde in der Nähe des kritischen Punktes das Verhalten der Korrelationslängen untersucht. Die gewonnenen Resultate wurden anschließend zur Bestimmung der Skalenfunktionen g_ξ^T und g_ξ^L verwendet.

Das 2nd-Moment-Verfahren liefert im Vergleich zu den beiden anderen Verfahren die schlechtesten Schätzungen der Korrelationslängen. Mit dieser Methode ergeben sich nur gute Ergebnisse, wenn die Korrelationslängen nicht zu groß sind, denn sonst sind die Werte $\xi_{L,T}^{2nd}$ zu klein. Mit dem Fourier-Verfahren erhält man für nahezu alle Parameterkombinationen sinnvolle Resultate, jedoch ist diese Methode bei kleinen Korrelationslängen nicht mehr sehr genau, weil dann die in die Berechnung eingehenden Fouriertransformierten $F_{L,T}$ und Suszeptibilitäten $\chi_{L,T}$ in der gleichen Größenordnung liegen. Die Fit-Methode dagegen hat eine andere Schwierigkeit. Sie liefert zwar innerhalb der Fehlergrenzen fast immer dieselben Resultate wie die Fourier-Methode mit größerer Genauigkeit, aber bei der longitudinalen Korrelationslänge existieren in der gebrochenen Phase bei kleinen Feldern höhere Zustände, die das Ergebnis des Fit-Verfahrens verfälschen. Aus der Variation der unteren Fitgrenze τ_{min} resultieren teilweise sehr unterschiedliche Werte, ohne daß man auf einen Grenzwert schließen kann.
Insgesamt scheint demnach für große Korrelationslängen das Fourier-Verfahren bei den betrachteten Gittergrößen die besten Ergebnisse zu liefern und für kleine ξ das Fit-Verfahren.

Durch die Analysen am kritischen Punkt wurden die kritischen Amplituden der Korrelationslängen auf zwei verschiedene Arten bestimmt, woraus das Ergebnis $2\xi_L \approx \xi_T$ resultierte. Außerdem haben die Untersuchungen gezeigt, daß für das O(4)-Modell auch für die Korrelationslängen *Corrections to Scaling* vernachlässigt werden können.

In der gebrochenen Phase dagegen konnte der Faktor zwei zwischen den beiden Korrelationslängen nicht nachgewiesen werden. Aber die Proportionalität $\xi_T \sim H^{-1/2}$ für $T < T_c$ konnte zweifelsfrei bestätigt werden, und $\xi_L \sim H^{-1/4}$ konnte zumindest für größere Felder gezeigt werden. Die vorliegenden Daten der longitudinalen Korrelationslänge sind aber für die kleinsten Felder nicht finite-size-frei, so daß hier bisher keine Aussage über deren Magnetfeldabhängigkeit gemacht werden kann. Hierzu wären weitere Untersuchungen nötig.
In der symmetrischen Phase zeigen die beiden Korrelationslängen für nicht allzu kleine Felder die gleiche Abhängigkeit vom Feld, und zwar $\xi_{L,T} \sim H^{-1/3}$.

Mit allen zur Verfügung stehenden Daten konnte der Verlauf der Skalenfunktionen g_ξ^T und g_ξ^L mit unterschiedlichem Erfolg ermittelt werden. Durch eine genaue Analyse von g_ξ^T war es möglich, den Bereich für die Parameterpaare (J, H) einzugrenzen, in dem die Punkte noch skalieren. Während für die transversale Korrelationslänge aufgrund kleiner Finite-Size-Effekte der Verlauf der Skalenfunktion im Bereich $-6 < z < 4$ angegeben werden konnte, ist der Verlauf von g_ξ^L nicht mit derselben Genauigkeit und nur in einem kleineren Bereich bestimmt, da für $z < -1.5$ keine skalierenden Werte vorliegen.
Der abschließende Vergleich mit der Skalenfunktion g_ξ der Korrelationslänge des Isingmodells macht den Einfluß des Goldstone-Effektes beim O(4)-Modell deutlich. Während die Funktionen g_ξ und g_ξ^L für $z > 0$ einen ähnlichen Verlauf aufweisen, geht g_ξ für $z \to -\infty$ wesentlich schneller gegen null als g_ξ^L, weil für das Isingmodell im Gegensatz zum O(4)-Modell die Korrelationslänge bei Annäherung an die Koexistenzlinie nicht divergiert.
Um die Fehler gerade bei der Bestimmung der Skalenfunktion der longitudinalen Korrelationslänge zu reduzieren, sind Messungen mit weitaus mehr Statistik notwendig. Außerdem wäre es für die Zukunft erstrebenswert, in dem Bereich $z < -1.5$ auf wesentlich größeren als den in dieser Arbeit verwendeten Gittern zu simulieren und bislang noch nicht existierende theoretische Vorhersagen zu dem Verlauf der Skalenfunktionen zu finden, mit denen unsere Ergebnisse verglichen werden könnten.

Anhang A

Verteilungen von F_L und F_T

Die Häufigkeitsverteilungen der Fouriertransformierten der Korrelationsfunktionen bei dem kleinsten nichtverschwindenden Impuls ($|\mathbf{p}| = 2\pi/L$) werden hier in Abhängigkeit der Gittergröße, dem äußeren Feld und der Kopplung näher untersucht. Außerdem werden die Erwartungswerte von F_L und F_T mit denen der Suszeptibilitäten χ_L und χ_T verglichen und darüberhinaus die Konsequenzen für die Korrelationslängen

$$\xi^F_{L,T} \;=\; \left(\frac{\chi_{L,T}/F_{L,T} - 1}{4\,\sin^2(\pi/L)} \right)^{\frac{1}{2}} \tag{A.1}$$

aufgezeigt.

Betrachten wir zunächst die Häufigkeitsverteilungen von F_L und F_T für verschiedene Gittergrößen bei der kritischen Kopplung und z. B. dem Feld $H = 0.002$ (Abbildung A.1). Auffällig ist die Verbreiterung der Verteilungen und eine Vergrößerung der Erwartungswerte von F_L und F_T für größere Gitterlängen. Diese Erwartungswerte sowie die der Suszeptibilitäten und die daraus resultierenden Korrelationslängen für $L = 24$, 48, 72 und 96 sind in Tabelle A.1 dargestellt, und aus diesen Werten lassen sich folgende Schlußfolgerungen ziehen. Während $\chi_{L,T}$ und $\xi_{L,T}$ zumindest für

L	F_L	χ_L	ξ_L	F_T	χ_T	ξ_T
24	8.51(4)	35.04(38)	6.76(5)	11.92(2)	88.99(18)	9.74(2)
48	14.62(9)	21.93(28)	5.41(10)	35.72(8)	99.68(62)	10.23(4)
72	17.39(8)	20.99(15)	5.22(14)	55.48(13)	99.72(49)	10.24(6)
96	18.52(9)	20.69(11)	5.23(19)	68.82(21)	99.61(37)	10.22(9)

Tabelle A.1: Die Fouriertransformierten, Suszeptibilitäten und Korrelationslängen für verschiedene Gittergrößen bei $J = 0.9359$ und $H = 0.002$.

$L \geq 48$ nahezu keine Finite-Size-Effekte aufweisen und somit unabhängig von der Gittergröße sind, ist für $F_{L,T}$ eine starke Abhängigkeit von L zu erkennen. Dies sollte uns aber nicht verwundern, da in den Definitionen (3.8) und (3.9) der Fouriertransformierten der Korrelationsfunktionen explizit die Gitterlänge L auftritt. Hierdurch wird deutlich, daß der Term $\sin^2(\pi/L)$ in der Beziehung (A.1) diese L-Abhängigkeit in $F_{L,T}$ kompensiert.
Abbildung A.2 zeigt die Verteilungen der Fouriertransformierten bei der kritischen Kopplung für $L = 72$ in Abhängigkeit von vier verschiedenen Feldern. Mit zunehmendem Feld, d. h. für sinkende Korrelationslängen, werden die Verteilungen spitzer und die Erwartungswerte kleiner. Dies ist auch zu erwarten, denn, wie Tabelle A.2 zu entnehmen, ist das Verhalten von $F_{L,T}$ ähnlich dem von $\chi_{L,T}$.

H	F_L	χ_L	ξ_L	F_T	χ_T	ξ_T
0.0005	39.59(14)	67.09(59)	9.55(9)	86.27(22)	299.9(18)	18.04(8)
0.002	17.39(8)	20.99(15)	5.22(14)	55.48(13)	99.72(49)	10.24(6)
0.005	9.09(4)	9.90(11)	3.42(24)	34.85(5)	48.27(15)	7.11(3)
0.01	5.42(2)	5.73(7)	2.77(31)	22.87(7)	27.71(16)	5.27(13)

Tabelle A.2: Die Fouriertransformierten, Suszeptibilitäten und Korrelationslängen für verschiedene Felder bei $J = 0.9359$ und $L = 72$.

Auch bei fixem H und variierender Kopplung ist die Ähnlichkeit des Verhaltens der Fouriertransformierten und der Suszeptibilitäten erkennbar (vgl. Tabelle A.3), denn sinkt F_L mit zunehmender Kopplung, so sinkt auch χ_L, dagegen wächst F_T wie auch χ_T. Das Besondere in diesem Fall ist die Tatsache, daß F_L eine spitze Verteilung um einen geringeren und eine breite um einen höheren Mittelwert hat, während es sich bei F_T genau umgekehrt verhält (Abbildung A.3). Dies ist damit zu erklären, daß die Korrelationslängen in der symmetrischen Phase auch bei eingeschaltetem (kleinem) Feld ungefähr gleich groß sind, ξ_L aber für wachsende Kopplungen abnimmt, während ξ_T zunimmt. Es gilt, je größer $\xi_{L,T}$, desto breiter die Verteilung und größer der Erwartungswert von $F_{L,T}$.

J	F_L	χ_L	ξ_L	F_T	χ_T	ξ_T
0.9	14.46(6)	16.47(18)	4.28(22)	18.72(28)	21.78(10)	4.63(8)
0.9359	9.09(4)	9.90(11)	3.42(24)	34.85(5)	48.27(15)	7.11(3)
1.0	3.48(1)	3.71(4)	2.92(27)	46.80(9)	76.99(42)	9.21(6)

Tabelle A.3: Die Fouriertransformierten, Suszeptibilitäten und Korrelationslängen für verschiedene Kopplungen bei $H = 0.005$ und $L = 72$.

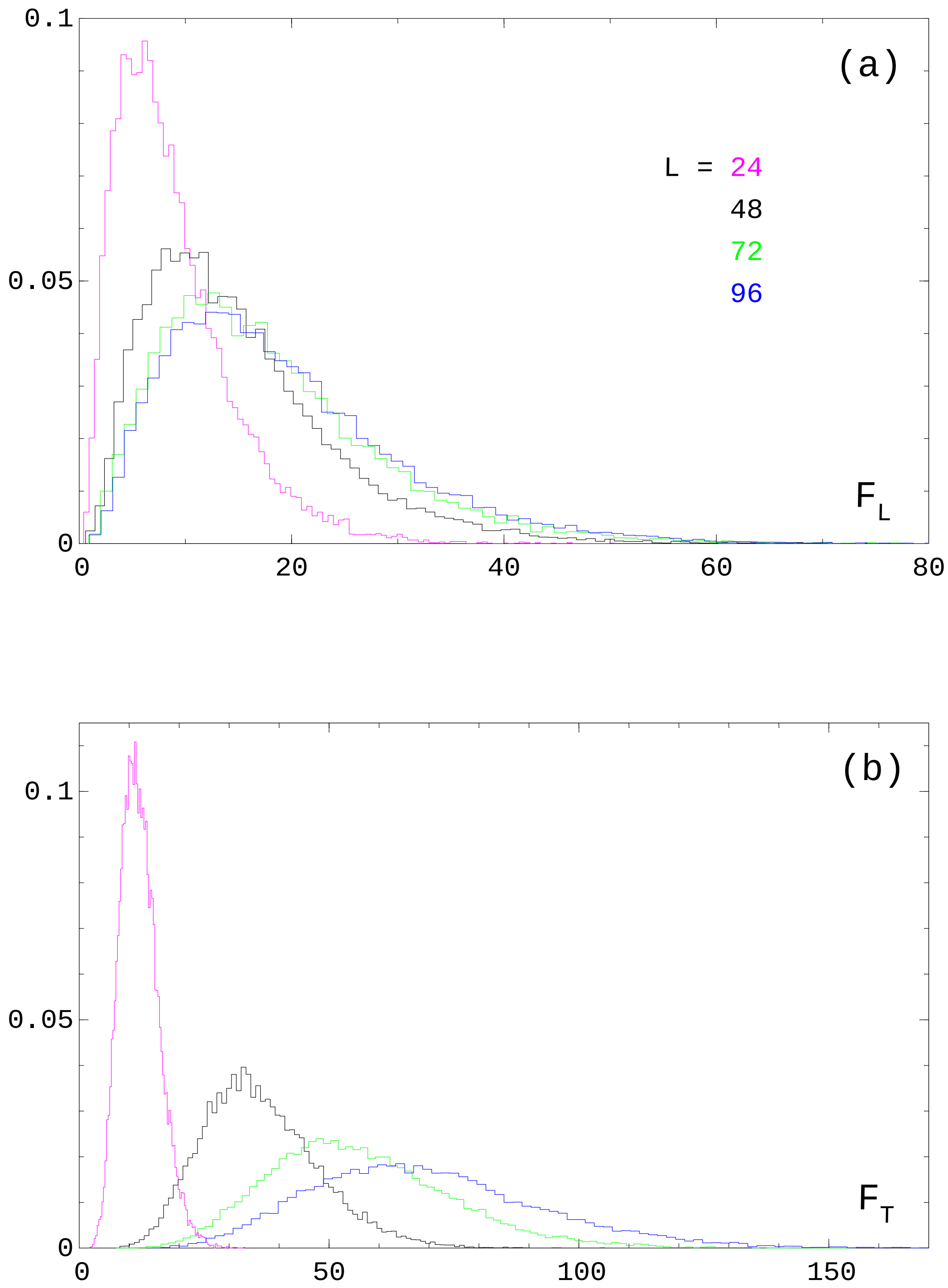
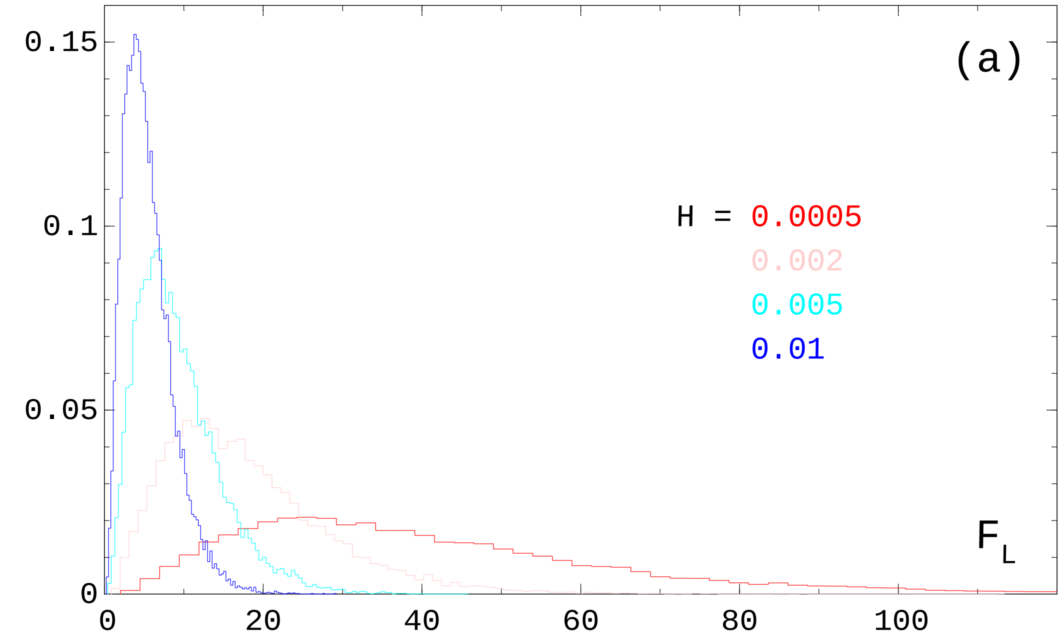


Abbildung A.1: Häufigkeitsverteilungen von F_L (a) und F_T (b) bei $J = J_c = 0.9359$ und $H = 0.002$ für verschiedene Gittergrößen.



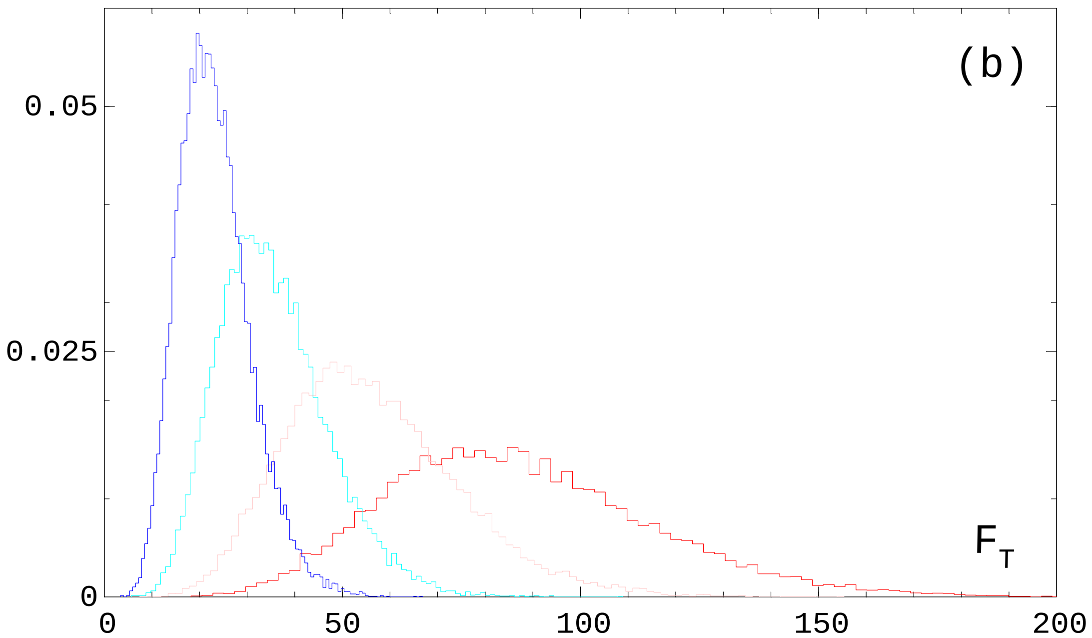


Abbildung A.2: Häufigkeitsverteilungen von F_L (a) und F_T (b) bei $J = J_c = 0.9359$ für verschiedene Felder ($L = 72$).

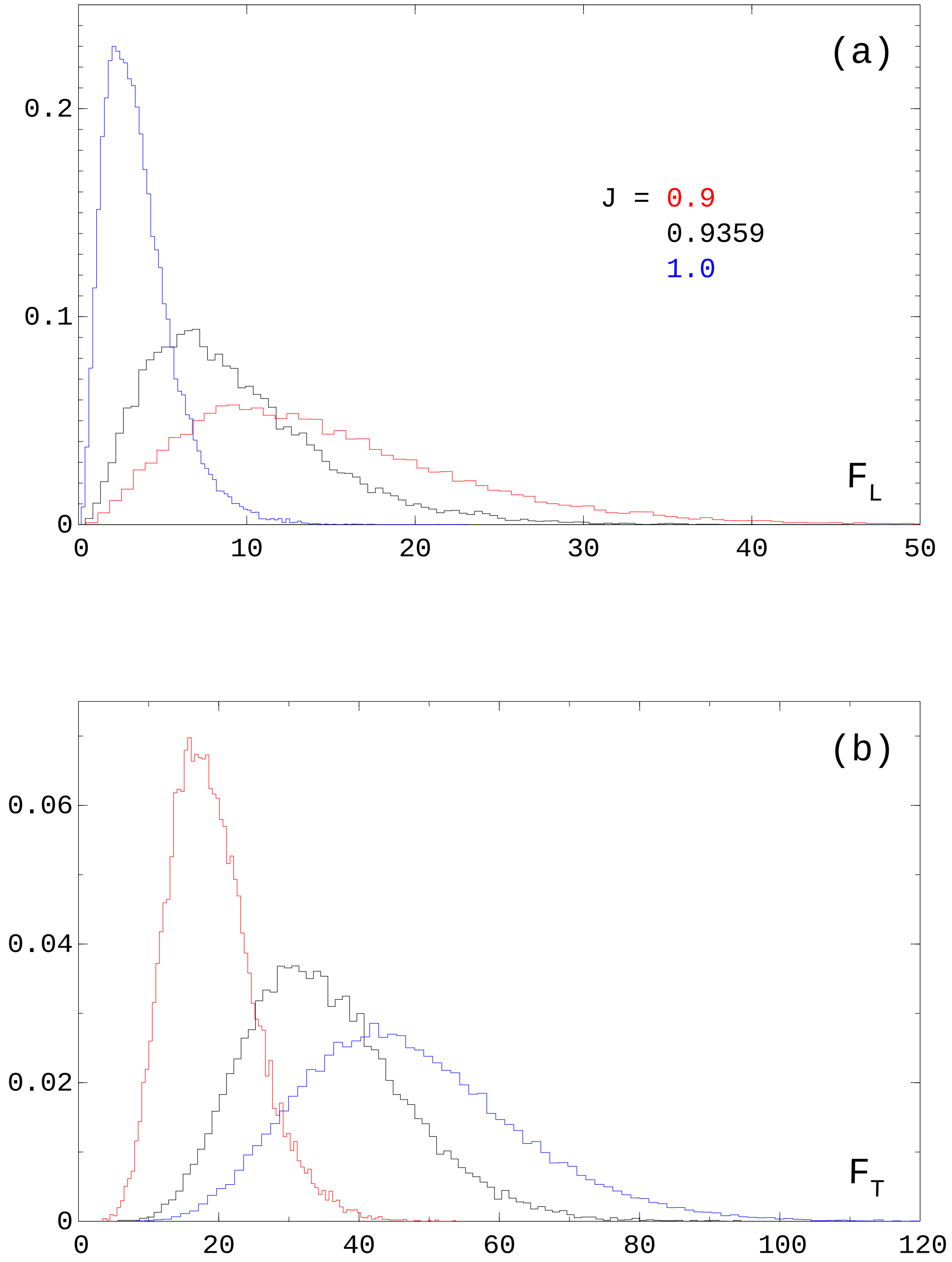


Abbildung A.3: Häufigkeitsverteilungen von F_L (a) und F_T (b) bei $H = 0.005$ für verschiedene Kopplungen ($L = 72$).

Literaturverzeichnis

[1] R. D. Pisarski, F. Wilczek, *Remarks on the chiral phase transition in chromodynamics*, Phys. Rev. D**29** (1984) 338.

[2] K. Rajagopal, F. Wilczek, *Static and dynamic critical phenomena at a second order QCD phase transition*, Nucl. Phys. B**399** (1993) 395.

[3] J. Engels, T. Mendes, *Goldstone-mode effects and scaling function for the three-dimensional* $O(4)$ *model*, Nucl. Phys. B**572** (2000) 289.

[4] J. Engels, S. Holtmann, T. Mendes and T.Schulze, *Finite-size-scaling functions for 3d O(4) and O(2) spin models and QCD*, Phys. Lett. B**514** (2001) 299.

[5] M. Seniuch, *Zustandsgleichungen und Korrelationslänge beim dreidimensionalen Isingmodell mit verbesserter Wirkung*, Diplomarbeit, Bielefeld (2002).

[6] J. M. Yeomans, *Statistical Mechanics of Phase Transitions*, Oxford University Press (1992).

[7] J. Zinn-Justin, *Quantum Field Theory and Critical Phenomena*, Clarendon Press, Oxford (1996).

[8] G. Parisi, *Statistical Field Theory*, Addison-Wesley (1988).

[9] F. Karsch, *Scaling of pseudocritical couplings in two-flavor QCD*, Phys. Rev. D**49** (1993) 3791.

[10] F. Karsch, E. Laermann, *Susceptibilities, the specific heat, and a cumulant in two-flavor QCD*, Phys. Rev. D**50** (1994) 6954.

[11] J. Cardy, *Scaling and Renormalization in Statistical Physics*, Cambridge Lecture Notes in Physics (1996).

[12] K. G. Wilson, *Die Renormierungsgruppe*, Spektrum der Wissenschaft, (Oktober 1979).

[13] T. Schulze, *Untersuchung von Goldstone-Effekten, Widom-Griffiths- und Finite-Size-Skalenfunktionen beim dreidimensionalen O(2)-Spinmodell*, Diplomarbeit, Bielefeld (2000).

[14] M. Caselle, M. Hasenbusch, *Universal Aplitude Ratios in the 3D Ising Model*, J. Phys. A**30** (1997) 4963.

[15] R. B. Griffiths, *Thermodynamic Functions for Fluids and Ferromagnets near the Critical Point*, Phys. Rev. **158** (1967) 176.

[16] E. Brezin, D. J. Wallace, K. G. Wilson, *Feynman-Graph Expansion for the Equation of State near the Critical Point*, Phys. Rev. B**7** (1973) 232.

[17] D. J. Wallace, R. K. P. Zia, *Singularities induced by Goldstone modes*, Phys. Rev. B**12** (1975) 5340.

[18] M. E. Fisher, V. Privman, *First-order transitions breaking O(n) symmetry: Finite-size scaling*, Phys. Rev. B**32** (1985) 447.

[19] A. Z. Patashinskii, V. L. Pokroskii, *Longitudinal susceptibility and correlations in degenerate systems*, Zh. Eksp. Teor. Fiz. **64** (1973) 1445.

[20] N. Metropolis, A. W. Rosenbluth, M. N. Rosenbluth, A. H. Teller, E. Teller, *Equation of State Calculations by Fast Computing Machines*, J. Phys. **21** (1953) 1087.

[21] U. Wolff, *Collective Monte Carlo Updating for Spin Systems*, Phys. Rev. **62** (1989) 361.

[22] S. Holtmann, *Kritisches Verhalten und Skalenfunktion des dreidimensionalen O(2)-Spinmodells*, Diplomarbeit, Bielefeld (2000).

[23] A. M. Ferrenberg, R. H. Swendsen, *New Monte Carlo Technique for Studying Phase Transitions*, Phys. Rev. Lett. **61** (1988) 2635.

[24] A. M. Ferrenberg, R. H. Swendsen, *Optimized Monte Carlo Data Analysis*, Phys. Rev. Lett. **63** (1989) 1195.

[25] E. Brezin, J. Zinn-Justin, *Renormalization of the Nonlinear σ Model in $2+\epsilon$ Dimensions - Application to the Heisenberg Ferromagnets*, Phys. Rev. Lett. **36** (1976) 691.

[26] K. Rajagopal, *The Chiral Phase Transition in QCD: Critical Phenomena and Long Wavelength Pion Oscillations*, Review Artikel, Quark Gluon Plasma 2, Editor R. Hwa, World Scientific (1995).

[27] J. J. Binney, N. J. Dowrick, A. J. Fisher, M. E. J. Newman, *The Theory of Critical Phenomena - An Introduction to the Renormalization Group*, Oxford University Press (1992).

Danksagung

Diese Arbeit wurde unter Anleitung von Prof. Dr. Jürgen Engels durchgeführt. Hiermit möchte ich mich bei Herrn Prof. Dr. Engels für seine hervorragende Betreuung und seine ständige Bereitschaft, sich mit Fragen ausführlich auseinanderzusetzen, bedanken.
Außerdem gilt Michael Seniuch für eine sehr gute und produktive Zusammenarbeit während unserer gesamten Studienzeit ein besonderer Dank. Desweiteren hat die gesamte Arbeitsgruppe durch eine angenehme Atmosphäre erheblich zum Gelingen meiner Diplomarbeit beigetragen. Ich danke besonders Sven Holtmann und Thomas Schulze für ihre Hilfe bei Problemen und ihre wertvollen Tipps, wie auch Christian Schmidt, der für Fragen und Diskussionen stets offen war.

Ein herzlicher Dank gilt auch meinen Eltern, die mir das Studium der Physik ermöglicht haben, sowie meiner Freundin Miriam für ihre Geduld und Unterstützung.

Hiermit versichere ich, daß ich außer den im Literaturverzeichnis angegebenen Quellen keine weiteren Hilfsmittel bei der Anfertigung meiner Arbeit verwendet habe.