Kritisches Verhalten und Skalenfunktionen des dreidimensionalen O(2)-Spinmodells

Diplomarbeit
(revidierte Version)

Fakultät für Physik
Universität Bielefeld

vorgelegt von
Sven Holtmann

29. September 2000

Inhaltsverzeichnis

Einleitung **7**

1 O(N)-Spinmodelle und kritische Phänomene **11**

1.1 O(N)-Spinmodelle mit äußerem Feld 11

1.2 Goldstone-Effekt 14

1.3 Kritische Phänomene 16

1.3.1 Renormierungsgruppentheorie 16

1.3.2 Kritische Exponenten 21

1.3.3 Corrections to Scaling 23

1.3.4 Zustandsgleichung und Skalenfunktionen 24

1.3.5 Finite Size Scaling 25

1.4 Chirale Störungstheorie im O(2)-Modell 26

2 Quantenchromodynamik und O(N)-Modelle **29**

2.1 QCD im Kontinuum 29

2.2 QCD in Pfadintegralformulierung 31

2.3 QCD auf dem Gitter 32

2.4 Wilson- und Staggered-Fermionen 34

2.5 Verbindung zwischen O(N)-Modellen und der QCD 35

3 Numerische Methoden **37**

3.1 Monte-Carlo-Rechnungen 37

3.2 Markov-Prozesse 38

3.3 Wolff-Algorithmus mit äußerem Magnetfeld 39

3.4 Jackknife-Fehleranalyse 41

3.5 Die Multihistogramm-Methode 42

4 Auswertung und Numerische Resultate für das O(2)-Modell **43**

4.1 Kritische Temperatur, $T = T_c$ 45

4.2 Kalte Phase, $T < T_c$ 48

4.3 Heiße Phase, $T > T_c$ 56

4.4 Verschwindendes Magnetfeld, H=0 57

5 Die Skalenfunktion f_G des O(2)-Modells **61**

5.1 Vergleich der O(2)-Skalenfunktion mit O(4) und QCD-Daten 66

Zusammenfassung **73**

Abbildungsverzeichnis

1.1 Spinwelle. 15

1.2 Blockspintransformation im zweidimensionalen Ising-Modell. 17

1.3 Querschnitt des Hamiltonoperatorraumes. 19

3.1 Kopplung der Spins in Anwesenheit des Ghostspins. 40

4.1 Phasendiagramm. 44

4.2 Magnetisierung bei T_c in Abhängigkeit von $H^{1/\delta}$. 45

4.3 Magnetisierung bei T_c aus der Multihistogramm-Interpolation. 46

4.4 Korrigierte Magnetisierung bei T_c. 47

4.5 Magnetisierung bei J_c und bei $J = 0.5$. 48

4.6 Magnetisierung bei $J = 0.5$. 49

4.7 Suszeptibilitäten bei $J = 0.5$. 50

4.8 Magnetisierungen bei verschiedenen $T < T_c$ in der Nähe von T_c. . . . 51

4.9 Magnetisierungen bei verschiedenen $T < T_c$ weiter entfernt von T_c. . . 52

4.10 Volumenabhängiges Verhalten der Magnetisierung aus CPT in der Nähe von T_c. 54

4.11 Volumenabhängiges Verhalten der Magnetisierung aus CPT weiter entfernt von T_c. . . . 54

4.12 (Un)Korrigierte Magnetisierung bei $H = 0$. . . . 55

4.13 Magnetisierung bei $T > T_c$. . . . 56

4.14 Spontane Magnetisierung und Suszeptibilität bei $H = 0$. . . . 58

4.15 Finite Size Scaling bei $H = 0$. . . . 59

5.1 Skalenfunktion des O(2)-Modells (unkorrigierte Form) für die kalte Phase. . . . 62

5.2 Skalenfunktion des O(2)-Modells für die heiße Phase. . . . 64

5.3 Skalenfunktion des O(2)-Modells (korrigierte Form). . . . 65

5.4 Skalenfunktionen f_G des O(2)- und O(4)-Modells im Vergleich. . . . 66

5.5 Bestimmung der kritischen Kopplung für verschwindende Quarkmassen. 68

5.6 Logarithmischer Vergleich der O(2)-Skalenfunktion mit staggered QCD-Daten für $N_\tau = 4$. . . . 69

5.7 Vergleich der O(4)-Skalenfunktion mit staggered QCD-Daten bei verschiedenen N_τ. . . . 71

Einleitung

Die Quantenchromodynamik (QCD) ist die Theorie der starken Wechselwirkung. Sie ist verantwortlich für die Kernkraft und fungiert als Farbkraft zwischen den Quarks. Diese stellen wahrscheinlich die kleinsten Bausteine der Nukleonen dar und existieren als Fermionen in sechs verschiedenen Arten (*flavours*). Aufgrund des Pauli-Prinzips, d.h. der Forderung, dass zwei Fermionen sich nicht gleichzeitig in einem Quantenzustand aufhalten können, ist für Quarks die Einführung eines weiteren Freiheitsgrads nötig, der als Farbe (*colour*) bezeichnet wird. Vermittelt wird die QCD durch die sogenannten Gluonen. Diese besitzen ihrerseits Farbladung, so dass im Falle der QCD eine Selbstwechselwirkung der Austauschbosonen stattfindet. Typisch für die starke Wechselwirkung sind das *Confinement* und die *asymptotische Freiheit*. Qualitativ versteht man unter Confinement, dass nur farbneutrale Bindungszustände von Quarks realisiert sind, da die Anziehung durch die starke Wechselwirkung mit zunehmendem Abstand linear ansteigt. Asymptotische Freiheit bedeutet, dass die Farbladungsträger bei kleinen Abständen kaum wechselwirken, und sie sich somit als quasifreie Teilchen verhalten. Kleine Abstände bedeuten dabei große Impulsüberträge, d.h. hohe Temperaturen, und große Abstände kleine Temperaturen. Bereits mit dieser Überlegung kann man zu dem Schluss kommen, dass es zwischen Confinement und einem Quark-Gluon-Plasma der quasifreien Teilchen bei hoher Temperatur möglicherweise einen Phasenübergang bei einer kritischen Temperatur T_c geben sollte. Man nimmt an, dass dieser Übergang kurze Zeit nach dem Urknall stattgefunden hat, als sich die Materie unter T_c abkühlte, und Hadronen entstanden. Man versucht mittlerweile, diesen Übergang an großen Teilchenbeschleunigern durch Schwerionenstöße zu reproduzieren.
Nun gilt es, die Übergangstemperatur T_c, das Verhalten nahe T_c und die Art des Übergangs der QCD theoretisch zu untersuchen und Vorhersagen mit möglichen experimentellen Daten zu vergleichen.
Die Symmetriegruppe, welche die QCD als Farbkraft beschreibt, ist die lokale $SU(N_c)$- Gruppe mit N_c als Anzahl der Farbladungen, also $N_c = 3$. Der Ordnungsparameter ist der Polyakov-Loop, der in der gebrochenen Phase, in der die Quarks als quasifreie Teilchen existieren können, von Null verschieden ist. Der Fall $N_c = 2$ wird betrachtet, da $SU(2)$ einfacher ist als $SU(3)$, ebenfalls einen Phasenübergang besitzt und schon wesentliche Eigenschaften der QCD zeigt.

Ein weiterer Phasenübergang entsteht durch die chirale Symmetrie, die aus der Symmetrie der Lagrangedichte für f masselose Quarkflavours herrührt. Danach gibt es eine gebrochene Phase, in der Teilchen als massive Goldstone-Teilchen existieren können, und eine symmetrische Phase mit verschwindendem chiralen Ordnungsparameter. Es gibt bisher keinen theoretischen Grund, warum die kritische Temperatur des chiralen Phasenübergangs mit der des Confinement-Deconfinement-Phasenübergangs übereinstimmen sollte, aber numerische Studien deuten sehr stark darauf hin.
Mit dem wirkungsvollen Renormierungsgruppentheorie ist es nun möglich zu zeigen, dass unterschiedlichste physikalische Modelle gleiches kritisches Verhalten haben. Die Idee dahinter ist der Versuch, die relevanten Parameter eines Modells durch einen kleineren, möglicherweise einfacheren Satz von Parametern zu beschreiben, wobei die kritischen physikalischen Aspekte des Modells erhalten bleiben. Ergibt sich dabei eine Übereinstimmung zwischen zwei Modellen, so liegen diese in derselben sogenannten Universalitätsklasse. Allgemein hängen diese Universalitätsklassen nur von der Dimension d des Modells und der Symmetriegruppe des Hamiltionoperators ab. Daher versucht man für die (3+1)-dimensionale QCD im Kontinuum und auf dem Gitter ein entsprechend einfacheres Modell mit gleichem kritischen Verhalten zu finden. Man kann Überlegungen anstellen, die vermuten lassen, dass das dreidimensionale O(4)-Modell in derselben Universalitätsklasse liegen könnte wie QCD mit zwei masselosen flavours [18].
Es liegen numerische Ergebnisse vor, dass solche Fermionen in Wilson-Formulierung auf dem Gitter gut zu Ergebnissen des 3d-O(4)-Modells passen [23], obwohl in dieser Formulierung die volle chirale Symmetrie gebrochen ist und erst im Kontinuumslimes erreicht wird. Man kann auch zeigen, dass Fermionen in Staggered-Formulierung auf dem Gitter 3d-O(2)-Symmetrie besitzen. Da QCD-Simulationen auf dem Gitter in verschiedenen Formulierungen sowohl durch Gitterartefakte als auch durch die spezifische Formulierung ungenau und noch nicht universell normiert sind, ist ein Vergleich von Staggered-Fermionen sowohl mit O(2)- als auch O(4)-Daten noch nicht sehr aufschlussreich. In näherer Zukunft sollten genauere Ergebnisse der QCD vorliegen, die weitere Hinweise liefern sollten. Daher wäre es vorteilhaft, wenn sowohl das O(2)- als auch das O(4)-Modell in drei Dimensionen bis dahin bereits ausführlich untersucht wurden.
Spinmodelle sind aber von allgemeinerem Interesse. Neben den Aspekten hinsichtlich der QCD spielen sie auch eine wichtige Rolle für die Theorie und Experimente der kondensierten Materie. Dort stellen sie ebenfalls Modelle für Phasenübergänge dar. Das O(2)-Modell in drei Dimensionen beschreibt zum Beispiel den kritischen λ-Übergang von ^{4}He. Dabei ensteht aus viskosem flüssigem Helium beim Abkühlen unter $\approx 2K$ eine supraflüssige Komponente, die quasi reibungsfrei fließen kann.
Der Aufbau dieser Arbeit ist folgender. Im ersten Kapitel werden zuerst O(N)-Modelle bei Anwesenheit eines äußeren Feldes H mit ihren relevanten Parametern und Observablen vorgestellt. Ein zentraler Punkt dieser Modelle ist dabei der Goldstone-Effekt, der zu einem bestimmten Verhalten des Ordnungsparameters in der gebrochenen Phase für kleine Felder führt. Danach werden im Rahmen der Re-

normierungsgruppentheorie Universalitätsklassen und deren Nutzen erklärt. Ferner wird ein alternativer störungstheoretischer Ansatz vorgestellt, der es gestattet, das Verhalten des Ordnungsparameters auf der Koexixtenzlinie ($T < T_c; H = 0$) aus der Volumenabhängigkeit bei konstantem kleinen Feld zu berechnen.
Das zweite Kapitel beschäftigt sich mit der Formulierung der QCD im Kontinuum, ihrer Quantisierung in der Pfadintegralformulierung und der Regularisierung der QCD für ein endliches Gitter. Aufgrund der dort auftretenden Fermionenverdoppelung werden kurz die zwei unterschiedlichen Formulierungen der Wilson- und Staggered-Fermionen auf dem Gitter vorgestellt. Den Abschluss dieses Kapitels bildet eine kurze Motivation, warum die Universalitätsklasse der QCD mit zwei nahezu masselosen Quarks die des 3d-O(4)-Modells sein könnte, und dass der Fermionenanteil der Restsymmetrie in der Staggered-Formulierung auf dem Gitter durch das 3d-O(2)-Modell beschrieben werden kann.
Das dritte Kapitel beschreibt das verwendete Simulationsverfahren und die zur Auswertung benötigten Methoden, um die gewonnenen Daten zu diskutieren.
Im vierten Kapitel werden die numerischen Ergebnisse des dreidimensionalen O(2)-Modells am kritischen Punkt, in der kalten und in der heißen Phase in Abhängigkeit vom äußeren Feldes diskutiert. Das Verhalten des Ordnungsparameters auf der Koexistenzlinie wird auch mit Hilfe der chiralen Störungstheorie und durch Simulationen direkt bei verschwindendem Feld überprüft.
Im fünften und letzten Kapitel wird schließlich mit Hilfe der gewonnen Daten eine mögliche Skalenfunktion des O(2)-Modells berechnet und durch eine Parametrisierung beschrieben. Das Ergebnis wird mit der entsprechenden Skalenfunktion im O(4)-Fall und einigen vorliegenden Gittersimulationen für Staggered-Fermionen verglichen.

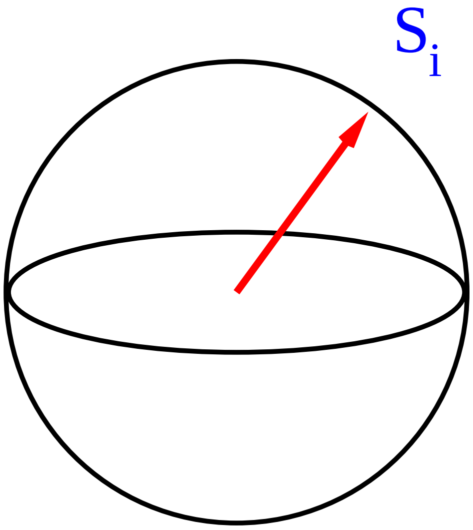
Kapitel 1

O(N)-Spinmodelle und kritische Phänomene

Phasenübergänge treten an den unterschiedlichsten Stellen in der Natur auf. Daher ist es unter anderem nützlich, ihr Verhalten an einfacheren Spinmodellen zu untersuchen, die eventuell zu gleichem Verhalten neigen. Viele wichtige Ergebnisse hinsichtlich Phasenübergänge wurden durch das Studium solcher Modelle gewonnen. Das beste Beispiel ist das Ising-Modell als ein Modell für einen Ferromagneten.
Phasenübergänge erkennt man an einer Singularität einer höheren Ableitung in dem entsprechenden thermodynamischen Potential, wie im Falle der zu untersuchenden O(N)-Modelle bei der freien Energiedichte. Sie lassen sich in zwei Klassen einteilen. Man unterscheidet Phasenübergänge erster und zweiter Ordnung.
Übergänge mit nicht verschwindender latenter Wärme werden dabei als Phasenübergänge erster Ordnung bezeichnet, während alle weiteren Fälle als Übergänge zweiter Ordnung oder als kontinuierlich bezeichnet werden.
O(N)-Modelle in drei oder vier Dimensionen haben einen Phasenübergang zweiter Ordnung mit einer Singularität der Suszeptibilität am kritischen Punkt.

1.1 O(N)-Spinmodelle mit äußerem Feld

Im Falle der O(N)-invarianten nicht-linearen σ-Modelle, kurz O(N)-Modelle, betrachtet man ein d-dimensionales kubisches Gitter des Volumens V mit periodischen Randbedingungen. Auf diesem Gitter sind die Gitterplätze i von N-komponentigen Einheitsvektoren (Spins $\mathbf{S}_i$) besetzt, die sich frei auf einer N-dimensionalen Kugel bewegen können, dargestellt in der folgenden Abbildung.



Diese Modelle sind definiert durch die Wirkung $\mathcal{H}$ und die daraus resultierende kanonische Zustandssumme Z

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

$$\Rightarrow\; Z \;=\; \int [\mathcal{D}\sigma] \exp\left\{-\beta\,\mathcal{H}_\sigma\right\}, \tag{1.2}$$

wobei $\mathbf{H}$ ein äußeres Feld und J die inverse Temperatur darstellt. Summiert wird im Gitter nur über nächste Nachbarn ($< i,j >$), während in der Zustandssumme über alle möglichen Spin-Zustände σ des gesamten Gitters integriert wird. Für die Kopplung $J = \frac{1}{T}$ soll $J > 0$ gelten, d.h. benachbarte Spins versuchen sich untereinander parallel und gleichzeitig in Richtung $\mathbf{H}$ auszurichten, um die Energie des Systems möglichst zu minimieren.
Die freie Energie $F(T, H, V)$ ergibt sich aus Z gemäß

$$F \;=\; -T\,\log(Z), \tag{1.3}$$

wodurch die freie, in T normierte Energiedichte f betimmt ist als

$$f \;=\; \frac{F}{V\,T} \;=\; -\frac{1}{V}\,\log(Z). \tag{1.4}$$

f enthält einen sigulären Teil, der für das kritische Verhalten im Grenzfall $V \to \infty$ verantwortlich ist, und einen regulären Anteil im Hintergrund. Die Energiedichte kann in diese Anteile $f_s(T, H, V)$ und $f_{ns}(T, V)$ zerlegt werden:

$$f \;=\; f_s(T, H, V) \;+\; f_{ns}(T, V). \tag{1.5}$$

Im Falle von N=1 erhält man das Ising-Modell.
Für $N > 1$ ist es sinnvoll, den Spinvektor $\mathbf{S}_i$ in eine longitudinale (parallel zu $\mathbf{H}$) und eine transversale Komponente zu zerlegen

$$\mathbf{S}_i \ = \ S_i^{||}\hat{\mathbf{H}} + \mathbf{S}_i^{\perp}. \tag{1.6}$$

Für $H = 0$ ist die Energie symmetrisch unter Transformationen der O(N)-Gruppe. Der Ordnungsparameter des Systems ist die Magnetisierung $M(T, H)$ parallel zum angelegten Feld $\mathbf{H}$, die durch

$$M \ = \ - \left(\frac{\partial f_s}{\partial H}\right)_T \ = < \frac{1}{V} \sum_i S_i^{||} > = < S^{||} > \tag{1.7}$$

definiert wird.
Im Falle von H=0 verschwindet der Erwartungswert von M am kritischen Punkt T_c des Phasenübergangs vollständig. Durch die Einführung von $H \neq 0$ wird die O(N)-Symmetrie explizit gebrochen, da Zustände parallel zu $\mathbf{H}$ bevorzugt werden.
Wichtig für die Untersuchung ist darüberhinaus die Suszeptibilität als Indikator von ungewöhnlichem Verhalten des Ordnungsparameters M. Durch die Zerlegung von $\mathbf{S}_i$ ergeben sich die zwei unterschiedlichen Suszeptibilitäten χ_L und χ_T. χ_L ist dabei die longitudinale, die direkt als Ableitung zu M gehört, und χ_T ist die transversale Suszeptibilität, welche die Fluktuationen des Erwartungswertes der transversalen Spinkomponente beschreibt. Gegeben sind diese Suszeptibilitäten durch

$$\chi_L \ = \ \left(\frac{\partial M}{\partial H}\right)_T \ = \ V(< {S^{||}}^2 > - M^2), \tag{1.8}$$

$$\chi_T \ = \ V\frac{1}{N-1} < {\mathbf{S}^{\perp}}^2 > = \ \frac{M}{H}. \tag{1.9}$$

Die Identität $\chi_T = M/H$ ist eine direkte Folge der O(N)-Invarianz der Theorie [9] und kann auch kurz folgendermaßen berechnet werden. Unter der Annahme, dass M parallel H ist, bewirkt eine kleine Veränderung von $\delta H \perp H$ eine Veränderung von $\delta M \perp M$. Der Übergang

$$H\hat{\mathbf{H}} \to H'\hat{\mathbf{H}}' \ = \ H\hat{\mathbf{H}} \ + \ dH_{\perp}\,\mathbf{e}_{\perp} \tag{1.10}$$

bewirkt aufgrund $H = H'$ eine Veränderung in H und M von

$$d\mathbf{H} \ = \ H(\hat{\mathbf{H}}' - \hat{\mathbf{H}}) \ \text{ und } \ d\mathbf{M} \ = \ M(\hat{\mathbf{H}}' - \hat{\mathbf{H}}), \tag{1.11}$$

was zu $\chi_T = M/H$ führt. Die Suszeptibilitäten können auch mit den Korrelationfunktionen $G_{L/T}$ des Ordnungsparameters ausgedrückt werden. Diese lauten

$$G_L(x) \ \equiv < S_0^{||} S_x^{||} > \ - \ < S_0^{||} >< S_x^{||} > \tag{1.12}$$

und

$$G_T(x) \ \equiv \ \frac{1}{(N-1)} \ < \mathbf{S}_0^{\perp} \cdot \mathbf{S}_x^{\perp} > . \tag{1.13}$$

Dann gilt mit den Fourier-Transformierten der Korrelationsfunktionen

$$\chi_L = \tilde{G}_L(0) = \sum_x G_L(x), \tag{1.14}$$

$$\chi_T = \tilde{G}_T(0). \tag{1.15}$$

Die Einführung von $G_{L/T}(x)$ erlaubt darüberhinaus eine Definition über das zweite Moment zu einer exponentiell abfallenden Korrelationslänge ξ gemäß

$$\xi^2 = \frac{1}{2d} \frac{\sum_x x^2 G_{L/T}(x)}{\sum_x G_{L/T}(x)}. \tag{1.16}$$

Für eine reduzierte Temperatur $\bar{t}$ mit

$$\bar{t} = \frac{T - T_c}{T_c} \tag{1.17}$$

divergiert diese Länge auf beiden Seiten der kritischen Temperatur mit dem Verhalten

$$\xi \propto |\bar{t}|^{-\nu}. \tag{1.18}$$

Dabei ist die Konstante ν ein spezifischer kritischer Exponent, auf den später noch genauer eingegangen wird.

1.2 Goldstone-Effekt

Man befindet sich beim O(N)-Modell in der kritischen Region, bestimmt durch die Parameter Temperatur und äußerem Feld, wenn die Suszeptibilität divergiert. Dies geschieht meistens für Temperaturen nahe an der kritischen und bei kleinem äußerem Feld.
Mathematisch ist der Hamiltonoperator des Systems bei Abwesenheit eines äußeren Feldes O(N)-symmetrisch. Physikalisch stellt sich aber in der kalten Phase nur ein Zustand mit einer konkreten Magnetisierungsrichtung ein, so dass die Symmetrie spontan gebrochen ist. Es verbleibt dann lediglich eine O(N-1)-Restsymmetrie in den transversalen Komponenten. Bei allen Temperaturen $T < T_c$ existieren im Grenzfall eines verschwindenden äußeren Feldes Zustände mit kleinen Anregungsenergien, die sogenannten Goldstone-Moden in den transversalen Spinkomponenten. Diese Anregungen sind sehr langwellige transversale Spinwellen (Abb. 1.1), die eine Korrelation zwischen den Spins erzeugen. Die Wellenlänge nimmt dabei für abnehmendes Feld zu, so dass sie im Grenzfall $H \to 0$ unendlich wird. Für die Suszeptibilität als Maß für die Korrelation bedeutet dies die Divergenz auf der gesamten Koexistenzlinie $(T < T_c, H = 0)$. Aus diesem Grund stellt der Übergang $H \to 0$ bei konstanter

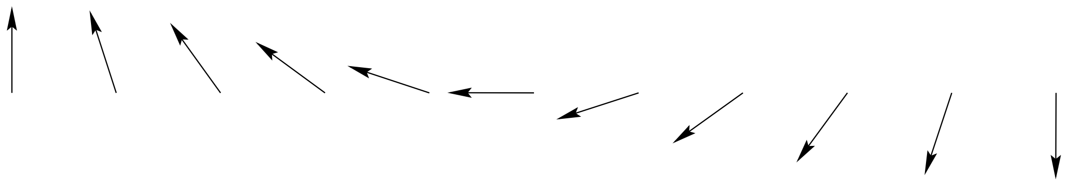


Abbildung 1.1: Spinwelle der transversalen Komponente im O(N)-Modell entlang einer Gitterrichtung.

Temperatur $T < T_c$ für das System einen Phasenübergang dar.
In der Quantenfeldtheorie entsprechen diese niedrigen Energiezustände der Existenz von masselosen Teilchen, die als Goldstone-Bosonen bezeichnet werden.
Einen funktionalen Zusammenhang zwischen der longitudinalen Suszeptibilität χ_L und dem Feld H erhält man aus der Landau-Ginzburg-Wilson-Theorie. Für ein N-komponentiges Feld $\mathbf{\Phi}$ geht man dabei [10] in der gebrochenen Phase und kleinem Feld von folgendem Hamiltonoperator aus

$$\beta\mathcal{H} \ = \ \int d^dx[\frac{1}{2}(\nabla\mathbf{\Phi})^2 + V(\Phi^2) - H\Phi_1]. \tag{1.19}$$

Unter der Annahme, dass $\mathbf{\Phi}$ die Länge eins hat, kann die longitudinale Komponente Φ_1 durch die $(N-1)$ transversalen Anteile gemäß

$$\Phi_1 \ = \ \sqrt{1-\Phi_T^2} \ \simeq \ 1 - \frac{\Phi_T^2}{2} \ \text{ mit} \tag{1.20}$$

$$\Phi_T^2 \ \equiv \ \sum_{i=2}^{N} \Phi_i^2 \tag{1.21}$$

durch Entwicklung ausgedrückt werden. Dann gilt für die longitudinale Suszeptibilität

$$\begin{aligned}
\chi_L \ &\equiv \ \int d^dx < [\Phi_1(x) - < \Phi_1 >][\Phi_1(0) - < \Phi_1 >] > \\
&\simeq \ \int d^dx < [-\frac{1}{2}(\Phi_T^2(x) - < \Phi_T^2 >)][-\frac{1}{2}(\Phi_T^2(0) - < \Phi_T^2 >)] > \\
&\propto \ \int d^dx < [\Phi_T^2(x) - < \Phi_T^2 >][\Phi_T^2(0) - < \Phi_T^2 >].
\end{aligned} \tag{1.22}$$

Mit der Feynman-Graph-Entwicklung erhält man im 3d-O(N)-Modell die Suszeptibilität bei kleinem Feld [10]:

$$\chi_L(T < T_c, H) \; = \; c_1\tilde{(T)}H^{-\frac{1}{2}} \; + \; c_2(T) \; + \; c_3\tilde{(T)}H^{\frac{1}{2}} \; + \; \ldots \; . \tag{1.23}$$

Daraus ergibt sich wegen $\chi_L = \partial M/\partial H$ durch Integration nach H eine von $H^{\frac{1}{2}}$ abhängige Form der Magnetisierung:

$$M(T < T_c, H) \; = \; M(T, 0) \; + \; c_1(T)H^{\frac{1}{2}} \; + \; c_2(T)H \; + \; c_3(T)H^{\frac{3}{2}} \; + \; \ldots \; . \tag{1.24}$$

Die $c_i(T)$ hängen auch von N ab.

1.3 Kritische Phänomene

1.3.1 Renormierungsgruppentheorie

Die Analyse von kontinuierlichen Phasenübergängen hat gezeigt, dass sehr verschiedene Modelle gleiches kritisches Verhalten zeigen. Dadurch gehören solche Modelle in dieselbe Universalitätsklasse. Dadurch wird es möglich, das Verhalten komplexerer Modelle zu verstehen, indem man ein einfacheres Modell aus der gleichen Universalitätsklasse untersucht. Diese Modelle haben zum Beispiel dieselben kritischen Exponenten, die den führenden funktionalen Zusammenhang zwischen Observablen und äußeren Parametern im kritischen Bereich beschreiben. Daher ist es nötig, eine Theorie am kritischen Punkt zu formulieren, die Universalität hinreichend erklärt und wenn möglich, sogar kritische Exponenten einer Klasse berechnen kann.

Die Idee der Renormierungsgruppentheorie ist es, ein physikalisches Problem durch einen einfacheren Satz von Parametern zu beschreiben, ohne das kritische Verhalten zu ändern. Dies geschieht durch Vernachlässigung der kurzreichweitigen Fluktuationen, so dass nur diejenigen Parameter erhalten bleiben, die für langreichweitige Fluktuationen verantwortlich sind. Umgesetzt wird diese Idee durch Renormierungsgruppentransformationen, welche die Skalen des Systems um einen Faktor b verändern. Dazu eignen sich z.B. Blockspintransformationen für Modelle, die auf einem diskreten Gitter definiert sind. Dabei werden ganze Gruppen von Gitterpunkten zusammengefasst und durch einen einzelnen neuen Gitterpunkt ausgetauscht. Variablen, die auf den alten Gitterpunkten definiert waren, werden durch eine neue, für die alte Gruppe repräsentative Variable ersetzt. Nun wird untersucht, wie sich der

Hamiltonoperator, die freie Energiedichte und die Zustandssumme ändern. Durch diese Transformation vergrößert der Gitterabstand von a auf $a' = ba$ mit $b > 1$.

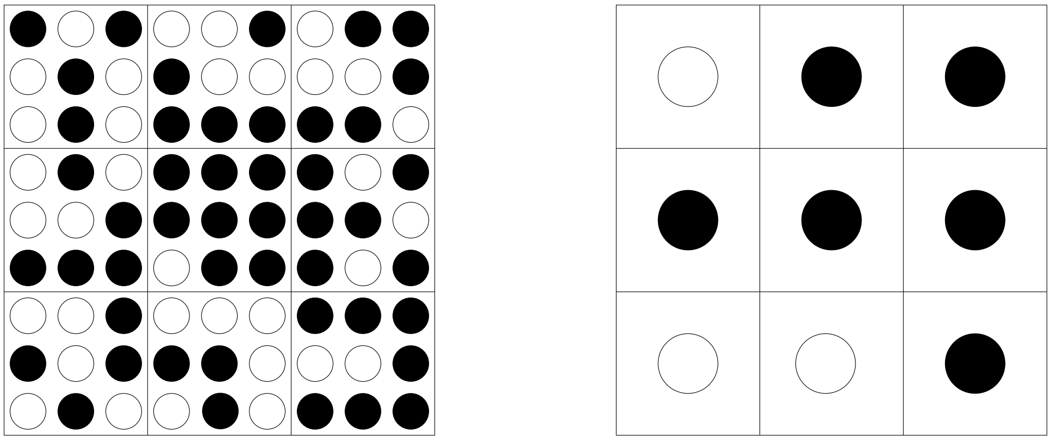


Abbildung 1.2: Blockspintransformation im zweidimensionalen Ising-Modell.

Abbildung (1.2) zeigt das Beispiel einer Blockspintransformation im Falle des zweidimensionalen Ising-Modells (weiss: Spin($\uparrow$), schwarz: Spin($\downarrow$)). Die lineare Ausdehnung des Gitters wurde gedrittelt, so dass neun Spins in eine Gruppe zusammengefasst werden können. Als repräsentativer neuer Spin wurde derjenige gewählt, der in einem Block häufiger vorkam.
Befindet man sich auf einem unendlichen Gitter in der heissen Phase des Systems, so sollte eine endliche Anzahl von Blockspintransformationen ausreichen, um völlige Unordnung zu erhalten. Auf der anderen Seite sollte sich in der kalten Phase eine Vorzugsrichtung ausbilden.
Im O(N)-Modell mit Feld kann man ebenfalls blocken und als Auswahlregel z.B. den Mittelwert der Spins eines Blocks weiterbenutzen.
Nach der ersten Transformation erhält man für den k-ten Block einen Spin der Form

$$\mathbf{S}_k^{(1)} = TF(\{\mathbf{S}_i^{(0)}\}) \tag{1.25}$$

mit einem funktionalen Zusammenhang TF der Ursprungsspins im k-ten Block. Eine Reskalierung des Gitters mit dem Faktor b^{-1} beendet die Transformation, so dass man ein Gitter mit der alten Gitterkonstanten a erhält. Dabei wurden aus

M Freiheitsgraden pro Block nur noch $M' = \frac{M}{b^d}$, und alle Längen wurden um den Faktor b reduziert. Wendet man Gleichung (1.25) n-fach an, so erhält man

$$\mathbf{S}_{k'}^{(n)} = TF(\{\mathbf{S}_{i'}^{(n-1)}\}). \tag{1.26}$$

Offensichtlich ändert sich hierbei der Hamiltonoperator $\mathcal{H}$, denn durch die Blockspintransformation ändert sich die Eigenschaft der Nächste-Nachbarn-Wechselwirkung des ursprünglichen Operators. Nach der Blockung spielen auch andere Kopplungen zwischen den Blockspins eine Rolle. Betrachtet man den ursprünglichen und die transformierten Hamiltonoperatoren als Funktion im unendlichdimensionalen Vektorraum aller möglichen Kopplungen, dann bewirkt eine geeignete Transformation eine Verschiebung in diesem Vektorraum von einem Kopplungsvektor $\mathbf{K}$ zu einem neuen Kopplungsvektor $\mathbf{K}'$. Dies geschieht gemäß einer allgemeinen Renormierungsgruppengleichung

$$\mathbf{K}' = \tilde{\mathbf{R}}(\mathbf{K}) \tag{1.27}$$

oder für den n-ten transformierten Hamiltonoperator

$$\mathcal{H}^{(n)} = \mathbf{R}(\mathcal{H}^{(n-1)}). \tag{1.28}$$

Notwendige Bedingung für die Transformation ist, dass sich die Zustandssumme

$$Z(\mathcal{H}^{(n)}) = Z(\mathcal{H}^{(n-1)}) \tag{1.29}$$

nicht ändert.
Im Falle $T \to \infty$ bleibt nach einer Transformation völlige Unordnung, während im Fall $T = 0$ stets komplette Ordnung erhalten bleibt. Deswegen besitzt diese Blockspintransformation mindestens zwei Fixpunkte, d.h. Punkte $\mathbf{K}$ im Kopplungsraum, an denen weitere Blockspintransformationen keine Veränderung bewirken, und deswegen $\mathbf{K}' = \mathbf{K}$ gilt. Diese Fixpunkte sind im Kopplungsraum Attraktoren, d.h. Punkte in ihrer Umgebung werden stets durch Transformation auf die Fixpunkte gelenkt. Dies impliziert das Vorhandensein von mindestens einer kritischen Hyperfläche zwischen dem Hoch- und Tieftemperaturfixpunkt. Diese Ebene kann man dann per Transformation nicht mehr verlassen. Doch auch hier kann ein Fluss zu einem eigenen Fixpunkt der Ebene stattfinden. Dieser Punkt $\mathbf{K}^*$ zeigt kritisches Verhalten und wird daher kritischer Fixpunkt genannt.

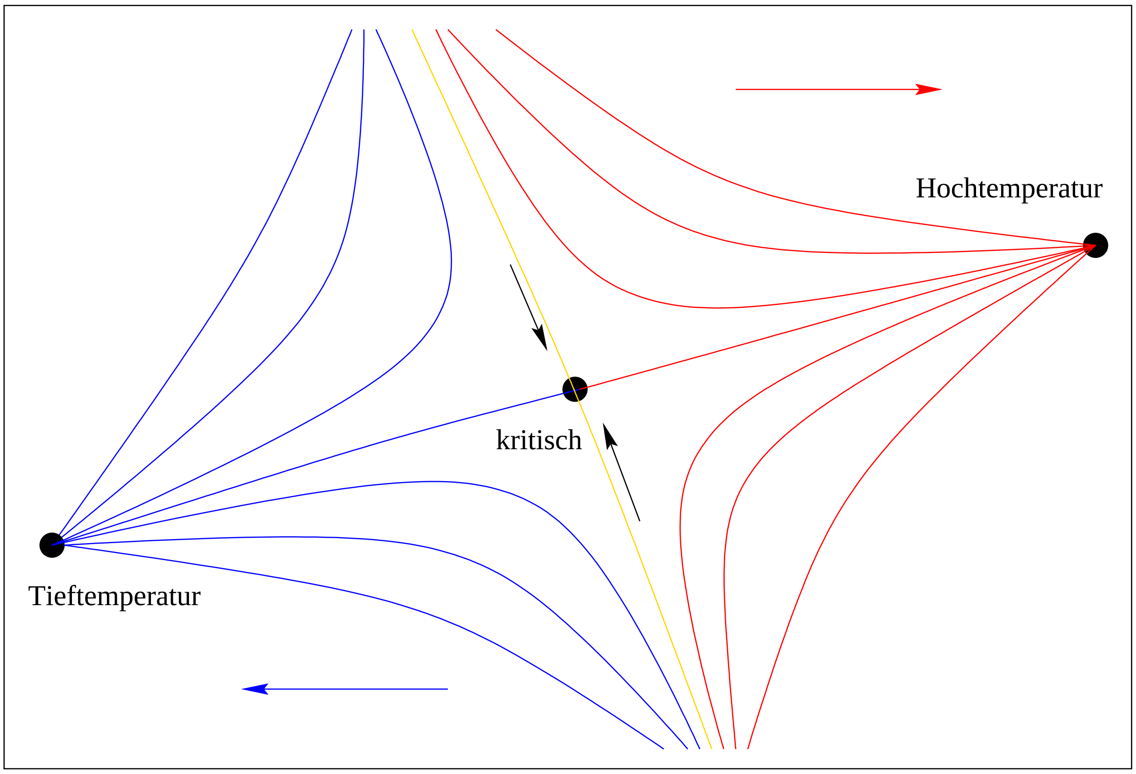


Abbildung 1.3: Querschnitt des Hamiltonoperatorraumes.

Abbildung (1.3) zeigt ein vereinfachtes Bild von Trajektorien im Kopplungsraum. Die gelbe Linie stellt dabei die kritische Hyperfläche dar, auf der Blockspintransformationen zum kritischen Fixpunkt im Zentrum führen. Befindet man sich außerhalb, so bewegt man sich von der Hyperfläche weg und nähert sich entweder dem Tief- oder dem Hochtemperaturfixpunkt.
Startet man sein System in der kritischen Fläche bei $\mathbf{K}$ und folgt einer Trajektorie, so stellt man fest, dass es immer schwieriger wird, seine Kopplungen zu ändern, während man sich auf $\mathbf{K}^*$ zubewegt. Versucht man, den kritischen Fixpunkt zu erreichen, divergiert die Anzahl der nötigen Transformationsschritte.
Wenn $\tilde{\mathbf{R}}$ aus (1.27) bei $\mathbf{K}^*$ beliebig oft differenzierbar ist, kann man (1.27) komponentenweise in der Nähe der kritischen Kopplungen als

$$K'_a \; - \; K^*_a \; \propto \; \sum_b T_{ab} \, (K_b \; - \; K^*_b) \tag{1.30}$$

schreiben, wobei $T_{ab} = \frac{\partial K'_a}{\partial K_b}|_{\mathbf{K}=\mathbf{K}^*}$ die Einträge der Matrix $\mathbf{T}$ sind. Ihre Eigenwerte seien λ^i und die linksseitigen Eigenvektoren $\mathbf{e_i}$. Durch sie wird die Renormierungsgruppentransformation am kritischen Punkt vollständig beschrieben. Nun definiert man sogenannte Skalenvariablen

$$u_i \; \equiv \; \sum_a e^i_a \, (K_a - K^*_a) \tag{1.31}$$

als Linearkombinationen der Differenzen $K_a - K_a^*$, die gemäß

$$u_i' \;=\; \lambda^i\, u_i \tag{1.32}$$

transformieren. Mit der Konvention $\lambda^i = b^{y_i}$ führt man die Eigenwerte der Renormierungsgruppentransformation ein, die mit den später definierten kritischen Exponenten zusammenhängen. Man unterscheidet die drei wichtigen Fälle

- $y_i > 0$: relevante Skalenvariablen, die das System nach wiederholter Renormierung vom Fixpunkt weglaufen lassen.
- $y_i < 0$: irrelevante Skalenvariablen, die zum Fixpunkt hinführen.
- $y_i = 0$: marginale Skalenvariable, bei der man keine Aussage über eine eventuelle Flussrichtung machen kann.

Für das Beispiel der O(N)-Modelle müssen zwei Kopplungen im Hamiltonoperator richtig gewählt sein, um zum kritischen Punkt zu gelangen. Dies ist die Temperatur T und das äußere Feld H. Daher erwartet man, dass es nur zwei relevante Skalenvariablen gibt. Diese sind u_t mit Eigenwert y_t für die reduzierte Temperatur $\bar{t} = (T - T_c)/T_c$ und u_h mit Eigenwert y_h für ein bisher beliebig reduziertes äußeres Feld $\bar{h} = H/H'$.
Aufgrund der Bedingung, dass sich die Zustandssumme bei Renormierungsgruppentransformationen nicht ändert, transformiert die freie Energiedichte inhomogen

$$f(\mathbf{K}) = g(\mathbf{K}) + b^{-d} f(\mathbf{K}'). \tag{1.33}$$

Interessiert ist man im allgemeinen an dem singulären Verhalten von f, z.B. wenn man kritische Exponenten berechnen will. $g(\mathbf{K})$ ist am kritischen Punkt eine analytische Funktion von K_a. Daher erhält man eine homogene Transformation für den singulären Anteil von f

$$f_s(\mathbf{K}') \;=\; b^d\, f_s(\mathbf{K}). \tag{1.34}$$

Unter Vernachlässigung von irrelevanten Skalenvariablen bleibt nahe am kritischen Punkt

$$f_s(u_t, u_h) \;=\; b^{-d}\, f_s(b^{y_t} u_t, b^{y_h} u_h) \tag{1.35}$$

übrig. Wählt man $b^{y_t} u_t = u_{t0}$ folgt die Identität

$$f_s(u_t, u_h) \;=\; |u_t/u_{t0}|^{\frac{d}{y_t}}\, f_s(\pm u_{t0}, u_h\, |u_t/u_{t0}|^{-y_h/y_t}). \tag{1.36}$$

Da die Renormierungsgruppentransformation bei endlich vielen Anwendungen analytisch bleibt, ist auch der Zusammenhang von (u_t, u_h) mit $(\bar{t}, \bar{h})$ analytisch. (u_t, u_h)

müssen im Falle $\bar{t} = \bar{h} = 0$ verschwinden, so dass man in der Nähe des kritischen Punktes folgende Form der Skalenvariablen u_t und u_h erhält

$$u_t \approx \bar{t}/t_0 \tag{1.37}$$
$$u_h \approx \bar{h}/h_0. \tag{1.38}$$

Somit ist der singuläre Anteil der freien Energiedichte in Abhängigkeit von Temperatur und Feld mit einer Skalenfunktion Φ

$$f_s(\bar{t},\bar{h}) = |\bar{t}/t_0|^{\frac{d}{y_t}} \, \Phi\left(\frac{\bar{h}/h_0}{|\bar{t}/t_0|^{y_h/y_t}}\right). \tag{1.39}$$

1.3.2 Kritische Exponenten

Mit Gleichung (1.39) und den in Kapitel 1.1 eingeführten Ableitungen der freien Energiedichte, lässt sich ein Zusammenhang zwischen Observablen, Temperatur und Feld finden. Die dabei auftretenden Exponenten sind für das jeweilige O(N)-Modell charakteristisch und heißen kritische Exponenten. Modelle mit gleichen kritischen Exponenten befinden sich in derselben Universalitätsklasse.
Für die spontane Magnetisierung bei $H = 0$ ergibt sich für $T < T_c$

$$\begin{aligned} M(T, H=0) &= -\left(\frac{\partial f_s}{\partial H}\right)_{H=0} \\ &= -|\bar{t}/t_0|^{\frac{d-y_h}{y_t}} \frac{\Phi'(0)}{h_0 H'} \\ &= (-t)^{\beta}. \end{aligned} \tag{1.40}$$

Der Exponent $(d - y_h)/y_t$ wird als kritischer Exponent β definiert, und $t \equiv (T - T_c)/T_0$ mit T_0 als entsprechend normierende Temperatur.
Die Suszeptibilität χ_L ist nach doppelter Ableitung

$$\begin{aligned} \chi_L &= -\left(\frac{\partial^2 f_s}{\partial H^2}\right)_{H=0} \\ &= -|\bar{t}/t_0|^{\frac{d-2y_h}{y_t}} \frac{\Phi''(0)}{h_0^2 H'^2} \\ &\propto t^{-\gamma} \end{aligned} \tag{1.41}$$

mit dem kritischen Exponenten $\gamma = (d - 2y_h)/y_t$. Für die spezifische Wärme $C_v = C_{ns} + C_s$ bei $H = 0$ findet man analog den kritischen Exponenten $\alpha = 2 - d/y_t$ im singulären Anteil mit

$$C_s \propto t^{-\alpha}. \tag{1.42}$$

Am kritischen Punkt T_c erfordert die Funktion $M(T_c, H)$ eine andere Vorgehensweise. Es gilt

$$\begin{aligned} M(T_c, H) &= -\left(\frac{\partial f_s}{\partial H}\right)_{T_c} \\ &= -|\bar{t}/t_0|^{\frac{d-y_h}{y_t}}\, \Phi'\left(\frac{\bar{h}/h_0}{|\bar{t}/t_0|^{y_h/y_t}}\right)_{T_c}. \end{aligned} \tag{1.43}$$

Verlangt man eine endliche Magnetisierung für $t \to 0$, so muss $\Phi'(x) \propto x^{d/y_h - 1}$ für $x \to \infty$ sein. Dadurch wird

$$\begin{aligned} M(T_c, H) &\propto \bar{h}^{\frac{d}{y_h}-1} \\ \Leftrightarrow M(T_c, H) &= h^{\frac{1}{\delta}}, \end{aligned} \tag{1.44}$$

abermals mit einem kritischen Exponenten $\delta = \frac{y_h}{d-y_h}$ und einer entsprechenden Normierung $h \equiv H/H_0$.
Man findet für die Korrelationsfunktion $G(r, t)$ bei $H = 0$ die Form

$$G(r, t) = |\bar{t}/t_0|^{\frac{2(d-y_h)}{y_t}}\, \Psi\left(\frac{r}{|\bar{t}/t_0|^{-1/y_t}}\right) \tag{1.45}$$

mit einer weiteren Skalenfunktion Ψ und dem Abstand r zwischen zwei Spins. Für große r ist $G \propto \exp(-r/\xi)$, so dass für die Korrelationslänge

$$\xi \propto |t|^{-\nu} \tag{1.46}$$

mit kritischem Exponent $\nu = 1/y_t$ gilt. Betrachtet man G am kritischen Punkt, erhält man darüberhinaus für die Korrelationsfunktion mit $\eta = d + 2 - 2y_h$ bei großem r

$$G(r, t = 0) \propto r^{-d+2-\eta}. \tag{1.47}$$

Die neu definierten Größen t und h sind die reduzierte Temperatur und das reduzierte Feld, die im Folgenden weiterverwendet werden.
Die sechs gefundenen Exponenten sind gegeben durch die beiden unabhängigen Eigenwerte

$$y_t = \frac{1}{\nu} \quad \text{und} \quad y_h = \frac{1}{\nu_c}, \tag{1.48}$$

womit nur zwei kritische Exponenten wirklich unabhängig sind. Es gibt daher Bestimmungsgleichungen, die alle Exponenten miteinander in Verbindung bringen und bereits vor dem Zugang der Renormierungsgruppentheorie bekannt waren

$$\alpha + 2\beta + \gamma = 2 \tag{1.49}$$

$$\alpha + \beta(1 + \delta) = 2 \tag{1.50}$$

$$2 - d\nu = \alpha \tag{1.51}$$

$$\nu(2 - \eta) = \gamma \tag{1.52}$$

$$\nu_c = \frac{\nu}{\beta\delta}. \tag{1.53}$$

An dieser Stelle sollte man erneut darauf hinweisen, dass die gefundenen Zusammenhänge zwischen Observablen und äußeren Parametern nur für den Grenzfall $t \to 0$ und $H \to 0^+$ gelten.
Es ist daher möglicherweise nötig, in den eingeführten Skalenfunktionen Korrekturen durch irrelevante kritische Exponenten und analytische Terme zu berücksichtigen.

1.3.3 Corrections to Scaling

Diese analytischen und nicht-analytischen Korrekturen zum universellen Verhalten der Skalenfunktion nennt man auch Corrections to Scaling.
Nimmt man in der freien Energiedichte (1.35) eine zusätzliche Abhängigkeit vom ersten irrelevanten Exponenten y_i an, dessen Skalenvariable u_3 in der Nähe des kritischen Punktes ungefähr konstant bleibt, ergibt sich die Form

$$f_s(u_t, u_h, u_3) \;=\; b^{-d}\, f_s(b^{y_t} u_t, b^{y_h} u_h, b^{y_i} u_3). \tag{1.54}$$

Setzt man $b^{y_h} u_h = 1$, so erhält man für die Energiedichte

$$f_s(u_t, u_h, u_3) \;=\; u_h^{d/y_h}\, f_s(u_h^{-y_t/y_h} u_t, u_h^{-y_i/y_h} u_3). \tag{1.55}$$

Für diese Arbeit ist z.B. das Verhalten man kritischen Punkt, von besonderem Interesse, wo $u_t = 0$ ist. Setzt man außerdem $u_h = c_H H$ und benutzt die kritischen Exponenten für y_h und insbesondere $y_i = (-\omega)$, so erhält man

$$f_s(c_H H, u_3) \;=\; (c_H H)^{1+\frac{1}{\delta}}\, f_s((c_H H)^{\omega\nu_c} u_3). \tag{1.56}$$

Mit der Abkürzung $X(H) = (c_H H)^{\omega\nu_c} u_3$ folgt für die Magnetisierung $M = -\partial f_s / \partial H$

$$\begin{aligned} M \;&=\; -\,c_H\,(1+\frac{1}{\delta})\, H^{\frac{1}{\delta}}\, f_s(X) \;-\; (c_H H)^{1+\frac{1}{\delta}}\, \frac{\partial X}{\partial H}\, \frac{\partial f_s(X)}{\partial X} \\ &=\; H^{\frac{1}{\delta}}\, \Theta_1(H^{\omega\nu_c}) \;+\; H^{\frac{1}{\delta}}\, \Theta_2(H^{\omega\nu_c}) \\ &=\; h^{\frac{1}{\delta}}\, \Theta_3(h^{\omega\nu_c}). \end{aligned} \tag{1.57}$$

Für $h \to 0$ ist $\Theta_3(h^{\omega\nu_c}) \approx 1$. Daher folgt für kleine h durch Entwicklung in $h^{\omega\nu_c}$

$$M \;=\; h^{\frac{1}{\delta}}\,(1 \,+\, \tilde{d}_c^1\, h^{\omega\nu_c}). \tag{1.58}$$

Fügt man zusätzlich noch eine erste analytische Korrektur hinzu, erhält man für die Magnetisierung auf der kritischen Isotherme mit Berücksichtigung erster Corrections to Scaling

$$M(t=0, H) \;=\; h^{\frac{1}{\delta}}\,(1 \,+\, \tilde{d}_c^1\, h^{\omega\nu_c} \,+\, \tilde{d}_c^2\, h). \tag{1.59}$$

Auf der Koexistenzlinie folgt analog

$$M(t \lesssim 0, H=0) \;=\; (-t)^{\beta}\,(1\,+\,\tilde{b}_1\,(-t)^{\omega\nu}\,+\,\tilde{b}_2\,(-t)). \tag{1.60}$$

Selbst diese Ansätze könnten nicht ausreichen, wenn weitere nicht-analytische Terme auftreten, die zu einem größeren systemathischen Fehler führen.
Für den Fall $H > 0$ und $t \neq 0$ gibt es wahrscheinlich auch Korrekturen, so dass es für eine universelle Skalenfunktion der O(2)-Universalitätsklasse in Kapitel 5 nötig sein könnte, auch diese Korrekturen zu berücksichtigen.

Die verwendete Wirkung (1.1) stellt einen Spezialfall des O(2)-symmetrischen Landau-Ginzburg-Modells in drei Dimensionen dar. Dieses ist definiert durch

$$\beta\,\mathcal{H} \;=\; -J\sum_{<i,j>}\mathbf{\Phi}_i\cdot\mathbf{\Phi}_j\;+\;\sum_i\Big[\mathbf{\Phi}_i^2\,+\,\lambda\,(\mathbf{\Phi}_i^2\,-\,1)^2\Big]. \tag{1.61}$$

Dabei ist $\mathbf{\Phi}_i \,\epsilon\, \mathbf{R}^2$ im Gegensatz zum normierten Vektor im O(2)-Modell. λ stellt eine Tuning-Konstante dar, die im Fall $\lambda = 0$ das Gauss-Modell und für $\lambda \to \infty$ das in dieser Arbeit verwendete Modell liefert.
Die systematischen Fehler durch Corrections to Scaling können durch eine geeignete Wahl der Wirkung in Abhängigkeit von λ reduziert werden [16]. Dadurch ist es möglich, erste Korrekturen durch irrelevante Exponenten in (1.60) verschwinden zu lassen ($\tilde{b}_1 = 0$). Führt man in diesem Modell ein äußeres Feld ein, ist eine Verbesserung für (1.59) möglich ($\tilde{d}_c^1 = 0$). In [16] wurde bereits $\lambda_{opt} = 2.1$ bestimmt, um erste Korrekturen zu beseitigen. Zum besseren Verleich mit dem O(4)-Modell, wo Corrections to Scaling gering sind [2], bleiben Simulationen mit $\lambda = \infty$ aber sinnvoll.

1.3.4 Zustandsgleichung und Skalenfunktionen

Bereits 1967 gab Griffiths explizit einen Zusammenhang zwischen den äußeren Parametern H, T und dem Ordnungsparameter M in der Nähe des kritischen Punktes an [11]:

$$H(M,T) \;=\; M|M|^{\delta-1}\tilde{f}(t|M|^{-1/\beta}). \tag{1.62}$$

Da $M, H > 0$ ist, folgt sofort eine bis hier unbestimmte Zustandsgleichung der Form

$$y \;=\; f(x) \tag{1.63}$$

mit

$$y \;\equiv\; \frac{h}{M^{\delta}} \tag{1.64}$$

$$x \;\equiv\; \frac{t}{M^{1/\beta}}. \tag{1.65}$$

Für $x = 0$, d.h. $t = 0$, ist $y = 1$ wegen $M = h^{1/\delta}$; für $y = 0$, d.h. $h = 0$ muss darüberhinaus $x = -1$ sein wegen $M = (-t)^{\beta}$. Damit ist

$$f(0) \;=\; 1 \quad \text{und} \quad f(-1) \;=\; 0. \tag{1.66}$$

Die Funktion $f(x)$ ist durch die Normierung von Temperatur und Feld universell, vernachlässigt aber irrelevante Skalenfelder.
Diese Darstellung ist äquivalent zu einer anderen universellen Skalenfunktion f_G der Form

$$Mh^{-1/\delta} \;=\; f_G(t/h^{1/\beta\delta}) \tag{1.67}$$

mit den Zusammenhängen

$$f_G \;=\; M/h^{1/\delta} \;=\; y^{-1/\delta} \quad \text{und} \quad t/h^{1/\beta\delta} \;=\; xy^{-1/\beta\delta}. \tag{1.68}$$

f_G kann genutzt werden, um direkt mit QCD-Gitter-Daten verglichen zu werden. Man erhält diese Funktion auch per Renormierung direkt aus Gleichung (1.35). Man braucht nur $b^{y_h}u_h = 1$ zu wählen und erhält M per Ableitung $M = -\partial f_s/\partial H$ in der gewünschten Art und Weise. Auch die Widom-Griffiths-Form ergibt sich so. Sie folgt analog für mit $b^{y_t}|u_t| = 1$.
Die Zustandsgleichung (1.63) wurde von Brézin et al. [12] in der ϵ-Entwicklung bis Ordnung ϵ^2 $[\epsilon = 4-d]$ gelöst. Wallace und Zia [10] betrachteten diese approximierte Lösung im Grenzfall $x \to -1$, d.h. in der kalten Phase nahe an der Koexistenzlinie. In diesem Limes wird die Funktion invertiert, um $x+1$ als Entwicklung in Potenzen von y und $y^{d/2-1}$ zu erhalten

$$x+1 \;=\; \tilde{c}_1 y \;+\; \tilde{c}_2 y^{d/2-1} \;+\; \tilde{d}_1 y^2 \;+\; \tilde{d}_2 y^{d/2} \;+\; \tilde{d}_3 y^{d-2} \;+\; \dots\,. \tag{1.69}$$

In der heißen Phase bei kleinem Feld lässt sich das Verhalten von $x(y)$ exponentiell durch Griffiths Analyzitätsbedingung [11] als folgende Reihe beschreiben

$$f(x) \;=\; \sum_{n=1}^{\infty} a_n\, x^{\gamma-2(n-1)\beta}\,. \tag{1.70}$$

1.3.5 Finite Size Scaling

Bislang galten alle Überlegungen nur im Grenzfall $V \to \infty$. Daher ist es auf Gittern mit zu kleiner linearer Ausdehnung $L = V^{1/d}$ möglich, Hinweise auf kritisches Verhalten nicht zu entdecken. Die Volumenabhängigkeit kann aber im singulären Teil der freien Energiedichte (1.35) berücksichtigt werden. Eine Renormierungsgruppentransformation reduziert die Ausdehnung des Gitters von L auf L/b, so dass folgende Abhängigkeit auftaucht

$$f_s(u_t, u_h, L) \;=\; b^{-d}\, f_s(b^{y_t}u_t, b^{y_h}u_h, L/b). \tag{1.71}$$

Wählt man $b = L/l_0$ mit l_0 als konstante systemunabhängige Referenzlänge, folgt

$$L^d\, f_s(u_t, u_h, L) \;=\; l_0^d\, f_s(b^{y_t} u_t, b^{y_h} u_h, l_0). \tag{1.72}$$

Bedenkt man $u_t \propto t$, $u_h \propto h$ und die kritischen Exponenten für y_t und y_h, ist nach kurzer Umformung

$$f_s(t, h, L) \;=\; L^{-d}\, Q(K_t t L^{1/\nu}, K_h H L^{\beta\delta/\nu}). \tag{1.73}$$

Durch Ableitung nach der Temperatur oder dem äußerem Feld erhalten Observablen $\mathcal{O}$ mit kritischem Verhalten die Form

$$\mathcal{O}(t, h, L) \;=\; L^{\frac{\rho}{\nu}} Q_0(K_t\, t\, L^{1/\nu}, K_h\, h\, L^{\beta\delta/\nu}). \tag{1.74}$$

Dabei steht $\mathcal{O}$ z.B. für die Magnetisierung M, so dass $\rho = -\beta$ ist, oder für die Suszeptibilität χ_L mit $\rho = \gamma$.
Das Verhalten in endlichem Volumen wird also durch die kritischen Exponenten der Theorie im Grenzfall unendlichen Volumens bestimmt.
Betrachtet man z.B. für den Fall $H = 0$ die Suszeptibilität χ_L, so sollte sich in der Nähe von $t \approx 0$ unter Vernachlässigung von Corrections to Scaling das Verhalten

$$Q_\chi(K_t\, t\, L^{\frac{1}{\nu}}, 0) \;=\; \chi_L\, L^{-\frac{\gamma}{\nu}} \tag{1.75}$$

einstellen, d.h. eine Kurve für verschiedene (L, χ_L)-Kombinationen.
Ähnliche Untersuchungen funktionieren auch bei $t = 0$ und auf der pseudokritischen Linie [1].

1.4 Chirale Störungstheorie im O(2)-Modell

Die Bestimmung von $M(T < T_c, H = 0)$ aus dem $\sqrt{H}$-Verhalten der Magnetisierung in der kalten Phase ist unter Umständen sehr aufwändig. Unerwünschte Finite Size-Effekte können nur vermieden werden, wenn die Ausdehnung des Gitters L viel größer ist als die Korrelationslänge. Dies ist für $H \to 0$ durch die Präsenz von Goldstone-Moden (Bosonen) aber unmöglich.
Einen alternativen Ansatz zur Berechnung der Größe $M(T < T_c, H = 0)$ stellt die Chirale Störungstheorie (CPT) dar. Sie gibt einen Zusammenhang zwischen Magnetisierung $M(T, H, V)$ und Volumen $V = L^d$ bei konstantem kleinem Feld und Temperatur an, der als Parameter gerade das gewünschte

$$M(T < T_c, H = 0, V \to \infty) \equiv \Sigma/\sqrt{J}$$

und weitere Konstanten enthält.
Dabei handelt es sich um eine Theorie, die eine Alternative zu Finite Size Scaling

darstellt, um den Einfluss von Goldstone-Moden (Spinwellen) mit Hilfe von effektiven Lagrange-Funktionen in endlichem Volumen zu verstehen.
Durch CPT ist es möglich, dieses Verhalten durch eine Entwicklung in $1/L$ zu beschreiben.

In der Feldtheorie repräsentiert Wirkung (1.1) die gitterregularisierte euklidische Wirkung des nicht-linearen σ-Modells. Dabei verbleibt oberhalb der kritischen Kopplung J_c eine Magnetisierung, auch wenn das äußere Feld abgeschaltet wird. Diese spontane Brechung der Symmetrie hat in der Feldthorie das Vorhandensein von masselosen Goldstone-Bosonen zur Folge, die zu Anregungen in transversaler Richtung gehören (Spinwellen). Wird ein kleines äußeres Feld in Richtung der ersten Feldkomponente hinzugeschaltet, erhalten diese Anregungen eine Masse m_π mit

$$m_\pi^2 \;=\; \frac{H\Sigma}{\sqrt{J}F^2}. \tag{1.76}$$

Dabei ist F die Zerfallskonstante der Goldstone-Bosonen und kann durch die Axialstrom-Korrelationsfunktion für $N = 2$ als

$$\int dx\, e^{ipx} \left\langle A_\mu(x)\, A_\nu(0)\right\rangle_{H=0;V=\infty} \;=\; \delta^{\mu\nu}\frac{iF^2}{p^2} + \ldots \tag{1.77}$$

mit $A_\mu = S^{\|}\partial_\mu S^{\perp} - S^{\perp}\partial_\mu S^{\|}$ definiert werden.
Für das O(2)-Modell im Spezialfall $d = 3$ reichen die beiden Konstanten Σ und F, definiert für $H = 0$ und $V = \infty$, aus, um Korrekturen der Zustandsumme bis zur Ordnung $1/L^2$ zu berücksichtigen. Die Goldstone-Bosonen-Zerfallskonstante ist durch $F^2 = \Upsilon$ auch mit dem Helizitäts-Modulus Υ verbunden. Dieser beschreibt das Ansteigen der freien Energie, wenn das äußere Feld langsam rotiert.
Beschränkt man sich auf endliches Volumen V, ist die Masse m_π der Goldstone-Bosonen verantwortlich für die führenden signifikanten Finite Size-Effekte bei kleinem Feld. Um die Chirale Störungstheorie anwenden zu können, müssen die Goldstone-Bosonen sehr wichtig für große Entfernungen im Gitter sein. Dies ist der Fall, wenn ihre Masse klein ist im Vergleich zur Masse m_σ des Teilchens der longitudinalen Komponente, d.h. $m_\sigma/m_\pi \gg 1$. Für die Spinmodelle bedeutet dies lange Spinwellen mit niedriger Energie, also kleine Felder in kleinen Gittern.
Dabei unterscheidet man zwei verschiedene Bereiche der Entwicklungen in $1/L$, je nach Größe des äußeren Feldes H und des einschließenden Volumens. Diese sind die ϵ-Entwicklung im Falle eines Feldes mit Verhalten $H \sim L^{-d}$ und die p-Entwicklung mit $H \sim L^{-2}$. Für die ϵ-Entwicklung sind die eingeführten Konstanten Σ und F ausreichend, während für die p-Entwicklung eine weitere Konstante nötig ist.
Beschränkt man sich auf die ϵ-Entwicklung, wo die totale magnetische Energie

$$u_0 = \Sigma H V$$

konstant gehalten wird bis zur Ordnung $O(1)$, so erhält man den möglichen Bereich zur Durchführung der Entwicklung durch die Beschränkung $m_\pi L \lesssim 1$, welche äquivalent ist zu

$$H\frac{\Sigma}{\sqrt{J}} \lesssim \left(\frac{F}{L}\right)^2. \tag{1.78}$$

Mit $\Sigma \sim (T_c - T)^\beta$ und $F \sim (T_c - T)^{\nu/2}$ ist

$$\frac{HL^2}{\sqrt{J}} \lesssim \frac{F^2}{\Sigma} \sim (T_c - T)^{\nu-\beta}. \tag{1.79}$$

Da $\nu - \beta > 0$ bedeutet dies, dass die Anwendbarkeit der ϵ-Entwicklung schlechter wird, wenn sich in der kalten Phase bei konstantem Feld die Temperatur T der kritischen Temperatur T_c nähert.
Führt man diese Entwicklung für große Volumen bis zur Ordnung $(1/L^2)$ im 3d-O(2)-Modell durch, so erhält man nach [19] die Zustandssumme

$$Z = \mathcal{N}\, Y_N(\rho_1 \Sigma H V)\, exp\left\{\rho_2 \left(\frac{\Sigma H V}{F^2 L^{d-2}}\right)^2\right\} \tag{1.80}$$

mit

$$Y_N(z) = \left(\frac{z}{2}\right)^{-\frac{N-2}{2}} I_{\frac{N-2}{2}}(z), \tag{1.81}$$

wobei I_ν die modifizierte Besselfunktion ist, und $\mathcal{N}$ eine volumenabhängige Normierungskonstante darstellt. Die volumen- und boxabhängigen Größen ρ_1 und ρ_2 sind im Falle von 3d-O(2)

$$\rho_1 = 1 + \frac{\beta_1}{2F^2 L} + \frac{{\beta_1}^2 - 2\beta_2}{8F^4 L^2}, \tag{1.82}$$

$$\rho_2 = \frac{\beta_2}{4} \tag{1.83}$$

mit den Formkoeffizienten $\beta_1 = 0.225785$ und $\beta_2 = 0.010608$ [19].
Die Magnetisierung $< \Phi^0 >= -\partial f/\partial H$ und die zugehörige longitudinale Suszeptibilität $\chi_L = \partial < \Phi^0 > /\partial H$ lassen sich jetzt direkt über die Ableitungen der freien Energiedichte f (erhalten aus Z) bestimmen

$$< \Phi^0 > = \Sigma\left\{\rho_1 \frac{Y_2'(u)}{Y_2(u)} + 2\rho_2 \Sigma H V \left(\frac{1}{F^2 L}\right)^2\right\}, \tag{1.84}$$

$$\chi_L = \Sigma^2 V \left\{{\rho_1}^2 \left[\frac{Y_2''(u)}{Y_2(u)} - \left(\frac{Y_2'(u)}{Y_2(u)}\right)^2\right] + 2\rho_2 \left(\frac{1}{F^2 L}\right)^2\right\} \tag{1.85}$$

mit $u = \rho_1 \Sigma H V$ und $Y_2(u) = I_0(u)$. Für die Ableitung $I_0'(u)$ gilt $I_0' = I_1$. Außerdem ist I_1' mit einer Rekursionsformel für Besselfunktionen $I_1' = I_0 - I_1/u$.

Kapitel 2

Quantenchromodynamik und O(N)-Modelle

Die Quantenchromodynamik (QCD) ist die fundamentale Theorie der starken Wechselwirkung und beschreibt die Wechselwirkung von Quarks und Gluonen als nicht-abelsche $SU(3)_c$-Eichtheorie.
Neben ihrem *flavour* besitzen Quarks auch eine Farbe (*colour*), einem weiteren Freiheitsgrad, der eingeführt wurde, um zur Erfüllung des Pauli-Prinzips z.B. dem Δ^{++} eine total antisymmetrische Wellenfunktion zu geben. Dazu sind drei verschiedene Farbladungen nötig, die z.B. als *grün, rot* und *blau* bezeichnet werden. Farbladungen bleiben in hadronischer Materie stets unsichtbar, d.h. es existieren nur farblose Teilchen.

2.1 QCD im Kontinuum

Die Lagrangedichte freier Quarks der Masse m_f in Abhängigkeit des Fermionenfeldes $\bar{\psi}$ lautet

$$\mathcal{L}(x) \;=\; \sum_{f,c} \bar{\psi}_c^f(x)\,(i\partial\!\!\!/ - m_f)\,\psi_c^f(x), \tag{2.1}$$

wobei über alle *flavour* f und alle Farben c summiert wird, und $\bar{\psi}_c^f(x) \equiv \psi^\dagger\gamma^0$ für das Feld des Antiteilchens steht.
Als Eichtheorie muss die Lagrangedichte der QCD invariant sein unter lokalen Eichtransformationen bezüglich der $SU(3)_c$-Farbladungsgruppe, d.h. alle Eigenschaften des Systems sollen bei solchen Transformationen der Felder erhalten bleiben.

Die Forderung der Invarianz unter lokalen $SU(3)$-Transformationen der Ableitungen lässt sich durch die sogenannte minimale Substitution erfüllen, indem eine neue kovariante Ableitung D_μ

$$D_\mu \;=\; \partial_\mu + ig_0 A_\mu(x) \tag{2.2}$$

die gewöhnliche Vierer-Ableitung ersetzt. Dabei werden Gluonenfelder $A_\mu(x)$ eingeführt, und g_0 ist eine nackte dimensionslose Kopplungskonstante. Die Gluonenfelder (Eichfelder) lassen sich durch die acht generierenden Gellman-Matritzen λ_l der Farbladungsgruppe darstellen als

$$A_\mu(x) \;=\; \sum_{l=1}^{8} A_\mu^l(x)\frac{\lambda_l}{2}. \tag{2.3}$$

Für ein Element $\Omega(x) \in SU(3)$ transformieren die Felder dann folgendermaßen:

$$\begin{aligned} \psi(x) &\longrightarrow \Omega(x)\psi(x) \\ \bar{\psi}(x) &\longrightarrow \bar{\psi}(x)\Omega^\dagger(x) \\ A_\mu(x) &\longrightarrow \Omega(x)A_\mu(x)\Omega^\dagger(x) - \frac{i}{g}\Omega(x)\partial_\mu\Omega^\dagger(x). \end{aligned} \tag{2.4}$$

Somit wird aus (2.1) die Lagrangedichte der Fermionen

$$\mathcal{L}_F(x) \;=\; \sum_{f,c} \bar{\psi}(x)_c^f(i\gamma^\mu D_\mu - m_f)\psi_c^f(x). \tag{2.5}$$

Die Gluonen sollen aber nicht nur als äußeres Feld dienen, sie sollen vielmehr eine eigene Dynamik, d.h. Selbstwechselwirkung besitzen und so in die Theorie mit einfließen. Dies ist ein wesentlicher Unterschied zu der Quantenelektrodynamik. Es ergeben sich dadurch völlig neue Eigenschaften, z.B. das typische Verhalten des *Confinements*, dass Quarks immer in gebundenen Zuständen auftreten und sich nur bei sehr hohen Energien als freie Teilchen beobachten lassen (*asymptotische Freiheit*). In der Theorie führt man die Selbstwechselwirkung in Form einer Lagrangedichte für die Gluonen als

$$\mathcal{L}_G(x) \;=\; -\frac{1}{4}\sum_a F_{\mu,\nu}^a(x)F_a^{\mu,\nu}(x) \tag{2.6}$$

ein. Dabei ist der kovariante gluonische Feldstärketensor $F_{\mu,\nu}$ bis auf einen Faktor durch den Kommutator der kovarianten Ableitungen definiert und lautet nach kurzer Umformung

$$F_{\mu,\nu}^a(x) \;=\; \partial_\mu A_\nu^a - \partial_\nu A_\mu^a - g_0 f^{abc} A_\mu^b A_\nu^c \tag{2.7}$$

mit den Strukturfunktionen f^{abc} der $SU(3)$. Der dritte Summand ist für die Selbstwechselwirkung der Gluonen verantwortlich. Die eichinvariante Lagrangedichte der QCD im Kontinuum ist dann die Summe

$$\begin{aligned} \mathcal{L}_{QCD}(x) &= \mathcal{L}_F(x) \;+\; \mathcal{L}_G(x) \\ &= \sum_{f,c} \bar{\psi}_c^f(x)(i\gamma^\mu D_\mu - m_f)\psi_c^f(x) - \frac{1}{4}\sum_a F_{\mu,\nu}^a(x)F_a^{\mu,\nu}(x). \end{aligned} \tag{2.8}$$

2.2 QCD in Pfadintegralformulierung

Es gibt zwei Möglichkeiten, die QCD zu quantisieren. Entweder quantisiert man sie durch Einführung der kanonischen Vertauschungs- und Antivertauschungsrelationen (zweite Quantisierung), oder man quantisiert per Pfadintegral, was hier kurz präsentiert werden soll.
Aus der Lagrange-Dichte der QCD (2.8) erhält man die Wirkung

$$S_{QCD}(A,\Psi,\bar{\Psi}) \;=\; \int \mathcal{L}_{QCD}\, d^4x, \tag{2.9}$$

so dass die Zustandssumme durch Integration über alle Felder folgendermaßen lautet:

$$Z \;=\; \int \mathcal{D}A\mathcal{D}\Psi\mathcal{D}\bar{\Psi}\, \exp[iS_{QCD}(A,\Psi,\bar{\Psi})] \;\equiv < 0|0 > . \tag{2.10}$$

Gleichzeitig ist diese als Vakuum-Vakuum Übergangsamplitude $< 0|0 >$ definiert. Mit diesem Funktional kann man Erwartungswerte von Operatoren $\mathcal{O}$ bzw. von Observablen durch zeitgeordnete, korrekt normierte Produkte (Greensfunktionen) der Form

$$< 0|\mathcal{O}(A,\Psi,\bar{\Psi})|0 > = \frac{1}{Z}\int \mathcal{D}A\mathcal{D}\Psi\mathcal{D}\bar{\Psi}\mathcal{O}(A,\Psi,\bar{\Psi})\exp[iS_{QCD}(A,\Psi,\bar{\Psi})] \tag{2.11}$$

berechnen. Durch die Greensfunktionen wird die QCD vollständig beschrieben.
Die Zustandssumme (2.10) erinnert an die Zustandssumme der statistischen Mechanik. Sie hat dieselbe generelle Struktur eines Integrals über alle möglichen Konfigurationen mit einem exponentiellem statistischen Gewicht. Verändert man die Zeitvariable in der QCD, kann diese Analogie verdeutlicht werden. Dies geschieht durch die sogenannte Wick-Rotation, bei der die Integrationsebene so gedreht wird, dass die Zeit analytisch ins Komplexe fortgesetzt wird mit

$$t \;=\; x_0 \quad\longrightarrow\quad -ix_4, \tag{2.12}$$

$$\partial_t \;=\; \partial_0 \quad\longrightarrow\quad i\partial_4. \tag{2.13}$$

Das 4er-Produkt wird dabei zu einem euklidischen Produkt in vier Dimensionen, da

$$x^2 \;=\; t^2 - |\mathbf{x}^2| \;\longrightarrow\; -(x_4)^2 - |\mathbf{x}^2| \;=\; -|x_E|^2. \tag{2.14}$$

Die Minkowski-Metrik wird euklidisch (E). Eine ähnliche Ersetzung für einen Teil des Eichfeldes der Form

$$A_0 \;\longrightarrow\; iA_4 \tag{2.15}$$

macht die neue euklidische Wirkung S^E_{QCD} darüberhinaus auch noch reell.
Statt über die gesamte Zeit t zu integrieren, wie im Falle der ursprünglichen Zustandssumme, wird die Integration in der imaginären Zeitrichtung nur über das endliche Intervall $[0;1/T]$ durchgeführt. Die Grenze $1/T$ ist für das betrachtete

System dabei die inverse Temperatur mit einem konstanten Wert.
Aus der alten Lagrangedichte wird durch Veränderung der Dirac-γ-Matritzen

$$\begin{aligned} \gamma_4^E &= \gamma_0 \\ \gamma_k^E &= -i\gamma_k \end{aligned} \tag{2.16}$$

eine euklidische Lagrangedichte $\mathcal{L}_{QCD}^E$. Man beachte, dass sich durch die Veränderung der γ-Matritzen auch die Vertauschungsrelationen ändern. In der euklidischen Form lauten sie

$$\left\{\gamma_\mu^E, \gamma_\nu^E\right\} = 2\delta_{\mu\nu},$$

und die euklidische Version der Lagrangedichte und ihre Wirkung sind

$$\begin{aligned} \mathcal{L}_{QCD}^E(x) &= \mathcal{L}_F^E(x) \;+\; \mathcal{L}_G^E(x) \\ &= \sum_{f,c} \bar{\psi}_c^f(x)(i\gamma_\mu^E D^\mu + m_f)\psi_c^f(x) + \frac{1}{4}\sum_a F_{\mu,\nu}^a(x) F_a^{\mu,\nu}(x) \end{aligned} \tag{2.17}$$

$$S_{QCD}^E = \int \mathcal{L}_{QCD}^E \, d^4x. \tag{2.18}$$

2.3 QCD auf dem Gitter

Bislang ist diese Theorie kontinuierlich, d.h. alle Felder sind für alle Raum-Zeit-Punkte definiert. Nun soll diese Eichfeldtheorie auf einem diskreten euklidischen Raum-Zeit-Gitter mit lokaler Eichinvarianz regularisiert werden, dessen Auswertung korrekte Aussagen über das Verhalten von Quarks macht. Zum Beispiel soll gezeigt werden, dass das Potential zwischen Quark-Antiquark-Paaren diese zusammenhält.
Zur Regulariserung führt man ein vierdimensionales Gitter wie folgt ein: Bei gegebenem Gitterabstand a definiert man einen diskreten Satz von Gitterpunkten $n \equiv (\vec{n}, n_4)$ mit vier Gittereinheitsvektoren in $\hat{\mu}$-Richtung. Verbindungen (Links) zwischen zwei benachbarten Gitterpunkten können eindeutig durch Aufhängepunkt und entsprechender Richtung charakterresiert werden. Bezeichnen N_x, N_y, N_z, und N_τ die Anzahl der Gitterpunkte in Raum- und Zeitrichtung, und wählt man im Raumteil alle $N_i \equiv N_\sigma$, so ist das räumliche Volumen $V = (N_\sigma a)^3$ bei einem gesamten Gitter der Größe $a^4(N_\sigma^3 \times N_\tau)$.
Die Temperatur T ist dann

$$T = \frac{1}{N_\tau \, a}. \tag{2.19}$$

Nun sind die fermionischen Felder lokal auf den Gitterpunkten definiert. Man erhält sie am Punkt n durch die Übergänge

$$\hat{\Psi}(n) = a^{\frac{3}{2}} \cdot \Psi(na) \tag{2.20}$$

$$\hat{\bar{\Psi}}(n) = a^{\frac{3}{2}} \cdot \bar{\Psi}(na) \tag{2.21}$$

$$\hat{m} = a \cdot m. \tag{2.22}$$

Zur Diskretisierung der Zustandssumme wird die Integration $\int d^4x$ zu einer Summation $a^4 \sum$ und Ableitungen zu Differenzenquotienten.
Die Eichfelder übermitteln die Wechselwirkung zwischen den Fermionen, d.h. zur Sicherstellung der lokalen SU(3)-Eichinvarianz betrachtet man die gluonischen Felder als die oben genannten Links zwischen den Gitterpunkten, d.h. als Operatoren $U_\mu(n) \in SU(3)$. Diese Links vom Punkt n zum Punkt $n + a\hat{\mu}$ lassen sich analytisch durch Schwingersche Linienintegrale

$$U_\mu(n) \;=\; exp\,[ig \int_n^{n+a\hat{\mu}} dx\, A_\mu(x)] \tag{2.23}$$

verwirklichen. Mit diesen Linkvariablen werden nun die bosonischen Eigenschaften beschrieben, die den periodischen Randbedingungen in Raum- und Zeitrichtung genügen.
Durch die Forderung, dass die Gitterwirkung im Falle von $a \to 0$ gegen die Kontinuumswirkung konvergieren soll, ergeben sich naive Diskretisierungen für den gluonischen und fermionischen Anteil der Wirkung. Der gluonische Anteil in der Standard-Wilson Formulierung ist

$$S_G(\{U\}) \;=\; \beta \sum_{n,\mu<\nu} \Big(1 - \frac{1}{N}\mathrm{ReTr} U_{\mu,\nu}(n)\Big)\,, \tag{2.24}$$

mit der Plaquette $U_{\mu,\nu}(n)$, dem kleinst möglichen geschlossenen Loop als Produkt von Linkvariablen

$$U_{\mu,\nu}(n) \;\equiv\; U_\mu(n)U_\nu(n+\hat{\mu})U_\mu^\dagger(n+\hat{\nu})U_\nu^\dagger(n) \tag{2.25}$$

und $\beta = \frac{2N}{g^2}$. Der naive fermionische Anteil der Wirkung lässt sich als

$$S_F(\hat{\Psi};\hat{\bar{\Psi}}) \;=\; \sum_{n,m;\alpha,\beta} \hat{\bar{\Psi}}_\alpha(n) K_{\alpha\beta}(n,m) \hat{\Psi}_\beta(m) \tag{2.26}$$

schreiben mit der Fermionenmatrix

$$K_{\alpha\beta}(n,m) \;=\; \sum_\mu \frac{1}{2}(\gamma_\mu)_{\alpha\beta}[\delta_{m,n+\hat{\mu}} \;-\; \delta_{m,n-\hat{\mu}}] \;+\; \hat{m}\delta_{mn}\delta_{\alpha\beta}. \tag{2.27}$$

Diese naive Diskretisierung weist einige Schwierigkeiten auf. Zum Beispiel stellt man im Falle verschwindender Eichfelder ($A_\mu = 0$) im Kontinuumslimes fest, dass für die 2-Punkt-Korrelationsfunktion $<\hat{\Psi}(x)\hat{\bar{\Psi}}(y)>$ pro Feldkomponente eine doppelte Entartung des Fermionen-Spektrums vorliegt. Prinzipiell sind alle Diskretisierungen, die im Grenzfall $a \to 0$ die korrekte Theorie liefern, möglich. Es ist daher wünschenswert, eine Diskretisierung zu wählen, welche die Fermionenverdoppelung vermeidet bzw. vermindert.

2.4 Wilson- und Staggered-Fermionen

Im Falle der Wilson-Fermionen (W) definiert man auf dem Gitter die Wirkung

$$S_F^W \;=\; S_F \,-\, \frac{r}{2}\sum_n \hat{\bar{\Psi}}(n)\,\hat{\Box}\,\hat{\Psi}(n) \qquad (2.28)$$

mit dem Ableitungsoperator $\hat{\Box} = a^2\Box$ und dem Wilson-Parameter r. Für $a \to 0$ ergibt sich die alte Kontinuumswirkung, da der Zusatzterm linear verschwindet. Diese Wirkung lässt sich mit Hilfe einer abgwandelten Fermionen-Matrix

$$\begin{aligned} K^W_{\alpha\beta}(n,m) \;&=\; (\hat{m} + 4r)\delta_{mn}\delta_{\alpha\beta} \qquad (2.29)\\ &-\; \frac{1}{2}\sum_\mu [(r-\gamma_\mu)_{\alpha\beta}\delta_{m,n+\hat{\mu}} \;+\; (r+\gamma_\mu)_{\alpha\beta}\delta_{m,n-\hat{\mu}} \end{aligned}$$

wieder in der Form

$$S_F^W(\hat{\Psi};\hat{\bar{\Psi}}) \;=\; \sum_{n,m;\alpha,\beta} \hat{\bar{\Psi}}_\alpha(n) K^W_{\alpha\beta}(n,m)\hat{\Psi}_\beta(m) \qquad (2.30)$$

formulieren. Der Vorteil dieser Formulierung ist es, daß fünfzehn der sechzehn Fermionen aus der Fermionenverdoppelung massiv werden und für die 2-Punkt-Funktion nun nichts beitragen. Bei dieser Formulierung ist auf dem Gitter aber die chirale Symmetrie für $\hat{m} \to 0$ explizit gebrochen.

Im Falle der Kogut-Susskind-Formulierung (Staggered Fermionen) ist der Ansatz ein ganz anderer. Man versucht die Komponenten der Dirac-Spinoren $\hat{\Psi}$ so auf das $N_\sigma^3 \times N_\tau$-Gitter zu verteilen, dass man sie als 4-komponentige χ-Felder betrachten kann, mit denen man die sechzehn Quarkfelder als Linearkombinationen der χ-Felder in Hyperkuben mit Ausdehnung $2a$ konstruieren kann. Dabei muss natürlich beachtet werden, dass im Limes die alte Kontinuumwirkung wieder auftritt. Durch diesen Übergang auf das neue Feld wird die Zahl der entarteten Fermionen geviertelt, und die volle kontinuierliche chirale Symmetriegruppe wird auf dem Gitter zu einer $U(1)_R \times U(1)_L$-Symmetrie.
Verwirklicht wird diese Verteilung durch die Einführung von unitären Transformationen $T(n) \in \mathbf{M}(4\times 4;\mathbf{C})$, die folgendermaßen auf Ψ und $\bar{\Psi}$ angewendet werden:

$$\begin{aligned} \Psi(n) \;&=\; T(n)\chi(n), \qquad (2.31)\\ \bar{\Psi}(n) \;&=\; \bar{\chi}(n)T^\dagger(n) \qquad (2.32) \end{aligned}$$

mit der Eigenschaft $T^\dagger(n)\gamma_\mu T(n+\bar{\mu}) = \eta_\mu(n)\mathbf{1}$. Dies ist durchführbar mit der Matrix

$$T(n) \;=\; \gamma_1^{n_1}\gamma_2^{n_2}\gamma_3^{n_3}\gamma_4^{n_4} \qquad (2.33)$$

und den sogenannten staggered Phasen

$$\eta_\mu(n) \ = \ (-1)^{n_1+\ldots+n_{\mu-1}} \quad , \ \eta_1(n) = 1. \tag{2.34}$$

Damit ist eine günstige Spin-Diagonalisierung der ursprünglichen Wirkung in Abhängigkeit der neuen Felder χ und $\bar{\chi}$ möglich, mit denen man die Fermionen korrekt beschreiben kann. Hier hat die Wirkung die Form

$$S_F^{KS}(\chi;\bar{\chi}) \ = \ \sum_{n,m}\bar{\chi}(n)K_{nm}^{KS}\chi(m) \tag{2.35}$$

mit der entsprechenden Fermionen-Matrix für staggered Fermionen

$$K^{KS}(n,m) \ = \ \sum_\mu \frac{1}{2}\eta_\mu(n)\Big([U(n)\delta_{m,n+\hat{\mu}} - U^\dagger(n-\hat{\mu})\delta_{m,n} - \hat{\mu}] + \hat{m}\delta_{m,n}\Big). \tag{2.36}$$

Da man weniger Freiheitsgrade hat und zumindest einen Teil der vollen chiralen Symmetriegruppe erhält, lohnen sich Simulationen in dieser Formulierung, um den chiralen Phasenübergang zu beschreiben. Darüberhinaus ist es auch noch möglich, die Gitterwirkung durch Hinzunahme von höheren Ordnungen des Gitterabstands zu verbessern.

2.5 Verbindung zwischen O(N)-Modellen und der QCD

Im weiteren sollen Argumente dafür angeführt werden, die vermuten lassen, dass die Universalitätsklasse der QCD mit zwei masselosen Quarkflavours die des 3d-O(4)-Modells ist, und es darüberhinaus für Gittersimulationen mit Staggered Fermionen wichtig ist, das 3d-O(2)-Modell zu studieren.
Die Lagrange-Dichte der QCD ist für zwei Quarkflavours mit Quarkmasse $m_q = 0$ symmetrisch unter chiralen Transformationen der Gruppe

$$SU(2)_L \times SU(2)_R \times U(1)_{L+R},$$

d.h. Symmetrie unter unabhängigen speziellen unitären Transformationen der links- und rechtshändigen Quarkfelder und einer vektoriellen $U(1)_V$-Transformation, die zur Baryonenanzahl-Symmetrie gehört. Eine zusätzliche axiale $U(1)_A$-Symmetrie der Baryonenzahl hätte $U(2)\times U(2)$-Symmetrie zur Folge, doch $U(1)_A$ ist eine Symmetrie der klassischen Theorie, nicht eine der Quantenfeldtheorie.
Die chirale Symmetrie ist bei kleinen Temperaturen spontan zu $SU(2)_{L+R}\times U(1)_{L+R}$ gebrochen und wird bei ausreichend hohen Temperaturen restauriert. Der einfachste

Ordnungsparameter dieses Phasenüberganges ist der Erwartungswert des chiralen Kondensats

$$\mathcal{M}_{i,j} \equiv < \bar{\Psi}_{L,i}\Psi_{R,j} > \quad ; \quad \mathcal{M}^{\dagger}_{i,j} \equiv < \bar{\Psi}_{R,i}\Psi_{L,j} > . \tag{2.37}$$

Dabei ist $\mathcal{M}$ eine 2×2-Matrix im Flavourraum. Wendet man die Transformation

$$\mathcal{M} \longrightarrow U^{\dagger}\mathcal{M}V \tag{2.38}$$

mit $U, V \in U(2)$ an, erhält man die volle $U(2) \times U(2)$-Symmetrie, welche die axiale Baryonenzahl-Symmetrie $U(1)_A$ enthält. Wird die Matrix $\mathcal{M}$ aber auf Vielfache von unitären Matrizen mit positiver Determinante beschränkt, bleibt $\mathcal{M}$ unter der Transformation (2.38) nur dann in einer abgeschlossenen Klasse, wenn U und V gleiche Phasen haben. Dabei verschwindet die axiale $U(1)_A$-Symmetrie.
$\mathcal{M}$ lässt sich mit vier reellen Parametern $\Phi^{\alpha} \equiv (\sigma, \vec{\pi})$ eindeutig als

$$\mathcal{M} = \sigma + i\vec{\pi} \cdot \vec{\tau} \tag{2.39}$$

unter Zuhilfenahme der drei Pauli-Matrizen $\vec{\tau}$ beschreiben. Angewendet auf Φ^{α} stellt die eingeschränkte Transformation (2.38) dann eine O(4)-Rotation im Raum $\{\Phi^{\alpha}\}$ dar. Der Ordnungsparameter des chiralen Phasenübergangs zweier masseloser Quarks sollte also unter der Voraussetzung, dass der QCD-Phasenübergang zweiter Ordnung ist, dieselbe Symmetrie haben wie der des 3d-O(4)-Modells.
Im Falle der Wilson-Fermionen auf dem Gitter scheinen die ersten Ergebnisse von Gittersimulationen der QCD gut zu den Ergebnissen für O(4) zu passen [23], obgleich auf dem Gitter die chirale Symmetrie in dieser Formulierung vollkommen gebrochen ist. Man nimmt an, dass vorliegende Simulationen die Kontinuumstheorie gut widerspiegeln.
Bei der Staggered-Formulierung sieht es anders aus. Auf dem Gitter bleibt dort eine Restsymmetrie $U(1) \times U(1)$. $U(1)$ ist in ihrer Darstellung äquivalent zu O(2), so dass für die Staggered-Formulierung der QCD auf dem Gitter ein Vergleich mit der Universalitätsklasse des 3d-O(2)-Modells nötig wäre. Erst im Kontinuumlimes kann man O(4)-Symmetrie erwarten.

Kapitel 3

Numerische Methoden

3.1 Monte-Carlo-Rechnungen

Der Erwartungswert einer Observablen $\mathcal{O}$ lässt sich in der statistischen Mechanik durch den Ausdruck

$$\begin{aligned} < \mathcal{O} > &= \frac{1}{Z} \sum_{\Phi} \mathcal{O}(\Phi) \exp[-\beta \mathcal{H}(\Phi)] \\ &\equiv \sum_{\Phi} \mathcal{O}(\Phi) P(\Phi) \end{aligned} \tag{3.1}$$

über die Konfigurationen Φ berechnen. Dabei ist $\beta = 1/kT$ (k $\hat{=}$ Boltzmann-Konstante), $P(\Phi)$ die Gibbs's Verteilung und Z die Zustandssumme, definiert durch

$$Z = \sum_{\Phi} \exp[-\beta \mathcal{H}(\Phi)]. \tag{3.2}$$

Im Allgemeinen existieren im Gitter unendlich viele verschiedene Konfigurationen, und selbst bei endlich vielen Spinzuständen wächst die Anzahl der Konfigurationen exponentiell mit der Größe des Systems, so dass die Summation (3.2) kaum durchgeführt werden kann. Daher führt man das Verfahren der Monte-Carlo-Rechnungen ein, um den Erwartungswert zu schätzen. Dabei betrachtet man endlich viele, zufällige Konfigurationen und berechnet nur über diese den geschätzten Erwartungswert (Simple Sampling). So kann es aber vorkommen, dass zufällig Konfigurationen gewählt werden, die einen sehr kleinen Gewichtsfaktor $\exp[-\beta \mathcal{H}(\Phi)]$ haben, und damit kaum zum Erwartungswert beitragen. Dies kann verbessert werden, indem man für den Erwartungswert Konfigurationen mit großen Gewichtsfaktoren sucht

(Importance Sampling). Wählt man N Zustände Φ_i, die bereits mit dem Gewicht $\exp[-\beta\mathcal{H}(\Phi)]$ verteilt wären, so ist der Erwartungswert gerade

$$< \mathcal{O} > = \frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N}\mathcal{O}(\Phi_i). \tag{3.3}$$

3.2 Markov-Prozesse

Ein Markov-Prozess ist eine Regel, wie man in einem System zufällig eine neue Konfiguration erzeugt, die nur von der alten abhing. Dazu betrachtet man zwei beliebige Konfigurationen $(\Phi_\alpha, \Phi_{\alpha'})$ eines gegebenen Systems. Befindet man sich in der Konfiguration Φ_α, so soll es eine Wahrscheinlichkeit $P(\Phi_\alpha \to \Phi_{\alpha'})$ geben, dass Φ_α innerhalb eines Markov-Schritts in den Zustand $\Phi_{\alpha'}$ übergeht. Es gilt

$$\sum_{\alpha'} P(\Phi_\alpha \ \to \ \Phi_{\alpha'}) = 1. \tag{3.4}$$

Nun soll eine sogenannte Markov-Kette erzeugt werden, d.h. eine Reihe von Zuständen aus Markov-Prozessen, die unabhängig von der gewählten Startkonfiguration immer zu einem Endpunkt führt, in dem die Zustände mit der gewüschten Gibbs's-Wahrscheinlichkeit p_α verteilt sind. Zur Sicherstellung dieser Grenzverteilung muss man von der Übergangswahrscheinlichkeit $P(\Phi_\alpha \to \Phi_{\alpha'})$ zwei Dinge fordern:

- Ergodizität: Von jeder beliebigen Startkonfiguration aus ist es möglich, eine beliebige Konfiguration nach endlich vielen Markov-Schritten zu erreichen.
- Mikroreversibilität (detailed balance): Die Wahrscheinlichkeit, das System im Zustand Φ_α vorzufinden und von dort in den Zustand $\Phi_{\alpha'}$ zu wechseln ist dieselbe wie für die Umkehrung

$$p_\alpha P(\Phi_\alpha \to \Phi_{\alpha'}) \ = \ p_{\alpha'} P(\Phi_{\alpha'} \to \Phi_\alpha). \tag{3.5}$$

Nehmen wir an, dass man ein $P(\Phi_{\alpha'} \to \Phi_\alpha)$ mit diesen Bedingungen finden kann, und dass eine Konfiguration Φ_α nach n Markov-Schritten mit der Wahrscheinlichkeit $W(\alpha, n)$ auftritt, die bereits gleich ihrer Gibbs'-Wahrscheinlichkeit p_α ist, dann gilt

$$\begin{aligned} W(\alpha, n+1) &= \sum_{\alpha'} p_{\alpha'} P(\Phi_{\alpha'} \to \Phi_\alpha) \\ &= p_\alpha \sum_{\alpha'} P(\Phi_\alpha \to \Phi_{\alpha'}) \\ &= p_\alpha. \end{aligned} \tag{3.6}$$

Damit ändert sich die Verteilung durch weitere Markov-Prozesse nicht mehr, wenn bereits die Gibbs'-Verteilung vorliegt.
Man kann weiter zeigen, dass der Unterschied D_n nach n Schritten zwischen der aktuellen Zustandswahrscheinlichkeit $W(\alpha, n)$ und der Gibbs'-Wahrscheinlichkeit mit fortschreitenden Markovschritten monoton abnimmt. Wenn

$$D_n \;=\; \sum_\alpha |W(\alpha, n) - p_\alpha| \tag{3.7}$$

ist, gilt für D_{n+1}:

$$\begin{aligned} D_{n+1} &= \sum_\alpha |W(\alpha, n+1) - p_\alpha| \\ &= \sum_\alpha |\sum_{\alpha'} W(\alpha', n) P(\Phi_{\alpha'} \to \Phi_\alpha) - p_\alpha P(\Phi_\alpha \to \Phi_{\alpha'})| \\ &= \sum_\alpha |\sum_{\alpha'} [W(\alpha', n) - p_{\alpha'}] P(\Phi_{\alpha'} \to \Phi_\alpha)| \\ &\leq \sum_{\alpha\alpha'} |W(\alpha', n) - p_{\alpha'}| P(\Phi_{\alpha'} \to \Phi_\alpha) \\ &= \sum_{\alpha'} |W(\alpha', n) - p_{\alpha'}| \\ &= D_n. \end{aligned} \tag{3.8}$$

Ein Beispiel für eine mögliche Übergangswahrscheinlichkeit $P(\Phi_\alpha \to \Phi_{\alpha'})$ ist z.B.

$$P(\Phi_\alpha \to \Phi_{\alpha'}) \;\equiv\; P_a \cdot P_t \tag{3.9}$$

mit dem Faktor

$$P_a \;=\; \min\left[1, \frac{P(\Phi_{\alpha'})}{P(\Phi_\alpha)}\right]. \tag{3.10}$$

Dabei ist P_t die Wahrscheinlichkeit, bei gegebener Konfiguration Φ_α als neue Konfiguration $\Phi_{\alpha'}$ zu wählen. Bis auf Symmetrie unter Vertauschung $\Phi_\alpha \leftrightarrow \Phi_{\alpha'}$ ist P_t beliebig.

3.3 Wolff-Algorithmus mit äußerem Magnetfeld

Ein Algorithmus mit konstanter Akzeptanzrate für den Markov-Prozess ist z.B. der folgende Wolff-Clusteralgorithmus.
Beim Phasenübergang in O(N)-Modellen ergeben sich Korrelationen auf allen Längenskalen. Dadurch bilden sich Blöcke von Spins in allen Größenordnungen (Cluster), in denen die Spins alle ungefähr in dieselbe Richtung zeigen. Um die Konfiguration in eine neue, möglichst unkorrelierte Konfiguration zu verwandeln,

die sich merklich von der alten unterscheidet, ist es nötig, solche Cluster durch einen Algorithmus in eine neue Richtung zu drehen, wobei sich die Energie kaum ändert.
Der von Wolff präsentierte Cluster-Algorithmus [20] verwendet zu diesem Zweck eine Verallgemeinerung des Spinflips im Ising-Modell auf O(N)-Modelle. Es ist nun lediglich nötig, das äußere Feld in den Algorithmus mit einzubinden.
Dazu wird, wie in Abb. (3.1) illustriert, zu den Spins auf dem Gitter, die untereinader mit der Stärke J koppeln, ein magnetisierender Ghostspin $\mathbf{S}_{ms}$ jenseits des Gitters definiert. Dieser Ghostspin ist den anderen gleichwertig bis auf den Unterschied, dass dieser an alle anderen Spins mit der Stärke H koppelt. Daher muss in der Aufnahmewahrscheinlichkeit die Kopplung J durch H ersetzt werden, sobald der Ghostspin beim Clusteraufbau abgefragt wird.

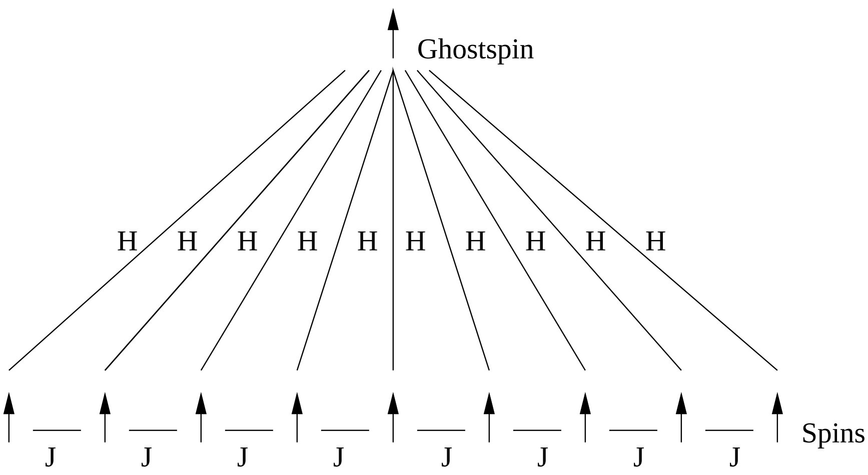


Abbildung 3.1: Kopplung der Spins in Anwesenheit des Ghostspins.

Ein Update des Algorithmus mit Ghostspin hat dann folgende Form:

- Wähle einen beliebigen Einheitsvektor $\mathbf{r} \in \mathbf{R}^2$.
- Bestimme einen beliebigen Startspin $\mathbf{S}_x$ an der Stelle $\mathbf{x}$ im Gitter der Größe $V = L^d$.
- Betrachte alle Nachbarspins $\mathbf{S}_y$ und füge sie dem Cluster mit der Wahrscheinlichkeit
$$P(\mathbf{S}_x, \mathbf{S}_y) = 1 - \exp\left[\min(0, 2J(\mathbf{r}\mathbf{S}_x)(\mathbf{r}\mathbf{S}_y))\right]$$
hinzu. Der Ghostspin ist Nachbar von allen Spins und wird mit der Wahrscheinlichkeit
$$P(\mathbf{S}_x, \mathbf{S}_{ms}) = 1 - \exp\left[\min(0, 2H(\mathbf{r}\mathbf{S}_x)(\mathbf{r}\mathbf{S}_{ms}))\right]$$
aufgenommen.

- Wiederhole diesen Schritt für alle Nachbarn der neu aufgenommenen Spins, bis keine neuen Spins dem Cluster mehr hinzugefügt werden. Dabei hat jeder Spin nur eine Möglichkeit, in den Cluster aufgenommen zu werden.

- Spiegle alle Spins des so erzeugten Clusters $C = \{\mathbf{S}_i\}$ an der Ebene senkrecht zu $\mathbf{r}$ mit der Vorschrift
$$\mathbf{S}_i^{'} = \mathbf{S}_i - 2(\mathbf{S}_i \cdot \mathbf{r})\mathbf{r}.$$

Dieser Algorithmus ist ergodisch, da jede beliebige Konfiguration durch endlich viele Spiegelungen einzelner Cluster, die nur aus einem Spin bestehen, erreicht werden kann.
Durch seine Konstruktion bewirkt ein Update im Allgemeinen eine große Veränderung der Konfiguration, sofern die Temperatur nicht zu hoch ist. Dies ist ein Vorteil gegenüber Algorithmen, die eine Konfiguration nur lokal verändern. Der Cluster-Algorithmus besitzt darüberhinaus theoretisch kein Critical Slowing Down. Es gibt also keine Abhängigkeit zwischen der Autokorrelationszeit τ, die den Abstand zweier unkorrelierter Konfigurationen beschreibt, und der Korrelationslänge ξ. Empirisch findet man
$$\tau \;\propto\; \xi^z \tag{3.11}$$
mit einem dynamischen algorithmusabhängigen kritischen Exponenten z. Dieser Exponent ist im Falle vom Metropolis-Algorithmus ungefähr $z \approx 2$, während beim Wolff-Algorithmus $z = 0$ ist. Eine Alternative zum Wolff-Algorithmus stellen z.B. der Heatbath- und der Overrelaxation-Algorithmus dar.

3.4 Jackknife-Fehleranalyse

Da die durch irgendeinen Algorithmus erzeugten Konfigurationen im Allgemeinen nicht unabhängig sind, sind die daraus gewonnenen Messungen der Energie und der Magnetiserungnen korreliert. Deshalb verwendet man für die Auswertung der Daten die sogenannte Jackknife-Fehler-Methode, die Korrelationen berücksichtigt und die Schätzung von Erwartungswerten und ihrem Fehler verbessert.
Dafür wird ein gesamter Datensatz in N gleichlange Blöcke eingeteilt, um N reduzierte Datensätze bilden zu können, von denen jeweils ein Block bei der Auswertung einer Messgröße nicht berücksichtigt wird. Ist μ der übliche Mittelwert der gesamten Messung und sind μ_i (i=1,..,N) die Mittelwerte der einzelnen Datenblöcke, kann man N statistisch unabhängige Pseudowerte des Jackknife der Form $J_i = N\mu - (N-1)\mu_i$ bilden. Das statistische Mittel über diese Werte liefert dann für eine Observable $\mathcal{O}$ den Wert
$$\bar{J} \;=\; \frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N} J_i \tag{3.12}$$

mit dem Fehler

$$s(\bar{J}) = \sqrt{\frac{\sum_{i=1}^{N}(J_i - \bar{J})^2}{N(N-1)}}. \tag{3.13}$$

Dies ist eine verbesserte Schätzung des Erwartungswertes und des zugehörigen Fehlers. Man muss aber beachten, dass die verwendete Blocklänge einigermaßen optimal gewählt sein muss. Dafür darf die Anzahl der Datensätze nicht zu klein sein, da die Gleichung (3.12) sonst nicht anwendbar ist. Außerdem sollte die Blocklänge länger als die Autokorrelation der Daten sein, damit der Fehler nicht unterschätzt wird.
Alle mit der Multihistogramm-Methode erzeugten Daten und der größte Teil der Messpunkte in dieser Arbeit sind mit der Jackknife-Methode analysiert worden.

3.5 Die Multihistogramm-Methode

Um den funktionalen Zusammenhang zwischen den Observablen und den äußeren Parametern Feld und Temperatur in O(N)-Modellen genau zu bestimmen, sind unter Umständen sehr viele und ausführliche Messungen bei verschiedenen Kombinationen der äußeren Parameter nötig. Dadurch wird der rechentechnische Aufwand groß. Dies gilt vor allem für den Fall, wenn man z.B. Extremstellen von Kurven aus Messpunkten exakt bestimmen möchte.
Die Multihistogramm-Methode, basierend auf einer Idee von Ferrenberg und Swendsen [21], stellt eine Möglichkeit dar, aus den einzelnen Messungen viel mehr Informationen zu erhalten. Es wird dann möglich, Observablen bei (J', H')-Kombinationen zu bestimmen, die sich in der Nähe eines gemessenen Punktes (J, H) befinden. Die Idee dieser Methode basiert auf der Tatsache, dass die Wahrscheinlichkeitsverteilung $P_{J/H}(S, M)$ der Energie S und Magnetisierung M hauptsächlich durch die von J und H unabhängige Zustandsdichte $W(S, M)$ bestimmt ist. Dadurch ist es bei Kenntnis von $P_{J/H}(S, M)$ möglich, von (J, H) auf (J', H') zu extrapolieren. Die Wahrscheinlichkeitsverteilung lässt sich aber nur sehr ungenau bestimmen, so dass Fehler schnell wachsen, wenn man auf Werte extrapolieren will, die jenseits der simulierten Daten liegen.
Verbessert wird diese Abschätzung durch die Analyse einer ganzen Reihe von Messpunkten, um aus diesen auf gewünschte Kopplungen zu extra- bzw. interpolieren.

Kapitel 4

Auswertung und Numerische Resultate für das O(2)-Modell

Im Folgenden wurde das dreidimensionale O(2)-Modell mit Hilfe des vorgestellten Cluster-Algorithmus simuliert. Das verwendete Fortran-Programm wurde in [2] benutzt und auf O(2) umgeschrieben. Gleichzeitig fand eine Beschleunigung des Programmes statt, und es wurde eine Overrelaxation-Routine hinzugefügt. Die Simulationen fanden auf Alpha- und Sun-Workstations in Bielefeld statt.
Diese Simulationen wurden auf einem dreidimensionalen Gitter mit periodischen Randbedingungen durchgeführt. Dabei betrug die lineare Ausdehnung der Gitter $L = 8 - 160$. Für diese Arbeit wurde die kritische Kopplung $J_c = 0.454165(4)$ benutzt, welche in [15] durch Simulationen bei $H = 0$ bestimmt wurde. Außerdem sind die in [16] ermittelten kritischen Exponenten ν, η und ω benutzt worden, um alle benötigten Exponenten durch die Skalenrelationen der kritischen Exponenten (SR) zu berechnen:

ν	0.6723(11)	[16]
η	0.0381(4)	[16]
ω	0.79(2)	[16]
β	0.3490(6)	SR
δ	4.7798(16)	SR
ν_c	0.40307(3)	SR

Tabelle 4.1: Verwendete kritische Exponenten des O(2)-Modells.

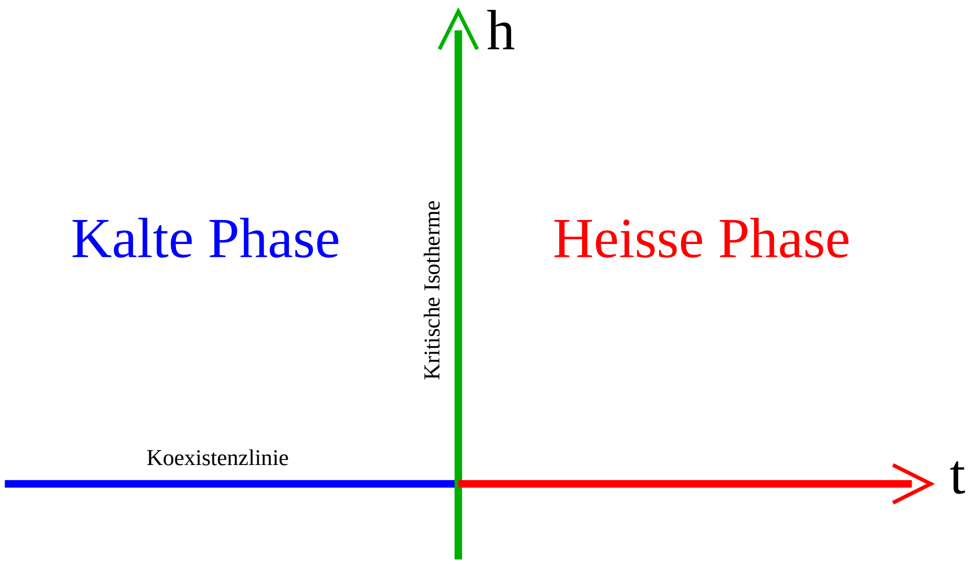


Abbildung 4.1: Phasendiagramm.

Bei den Simulationen sind insgesamt fünf verschiedene Größen gemessen worden: Die innere Energiedichte, die longitudinale Magnetisierung, der Betrag der transversalen Magnetisierung, die Clustergröße und die Fourierkomponente der Korrelationsfunktion. Die Messungen erfolgten nach einer variierenden Anzahl von Cluster-Updates, um möglichst unkorrelierte Daten zu erhalten. Diese Anzahl war dabei stark abhängig von der Temperatur und dem äußeren Feld. Für große Felder verringerte sich die Autokorrelation sowohl in der kalten als auch der heißen Phase. Im Falle der Temperatur zeigte sich in der heißen Phase, dass die Autokorrelation für größer werdende Temperatur stark anstieg, während sie für Temperaturen in der kalten Phase erst abnahm, um für sehr kalte Temperaturen wieder anzusteigen. Daher reichten in der kalten Phase z.B. fünf Updates zwischen den Messungen aus im Gegensatz zur heißen Phase, wo bis zu 800 Updates nötig waren. Die Anzahl der Messungen betrug zwischen 20000 bei den größten und 300000 bei den kleinsten Gittern.

Für die Bestimmung des Ordnungsparameters M in unendlichem Volumen wurde in einer Messreihe bei konstantem Parameterpaar (J, H) das Gitter so lange vergrößert, bis Magnetisierung und Suszeptibilität der beiden größten Gitter innerhalb der Fehler identisch waren. Diese Vorgehensweise war aber in Abhängigkeit von der Temperatur nur für ausreichend große Felder möglich.

Betrachtet man Abbildung (4.1), so wurden zuerst Simulationen auf der kritischen Isotherme (grüne Linie) durchgeführt, um daraus die Normierungsgröße H_0 zu bestimmen. Für die Normierungsgröße T_0, die aus dem Verhalten auf der Koexistenzlinie (blaue Linie) bestimmt wurde, waren Simulationen in der kalten Phase bei verschiedenen Kopplungen in Abhängigkeit des äußeren Feldes nötig, um den Grenzfall $H \to 0$ zu untersuchen. Mit Hilfe von zusätzlichen Messungen in der heißen Phase in der Nähe des kritischen Punktes, konnten die gesammelten Daten benutzt werden, um die Skalenfunktion f_G des O(2)-Modells zu ermitteln.

4.1 Kritische Temperatur, $T = T_c$

In diesem Abschnitt wurde das Verhalten des O(2)-Modells am kritischen Punkt in Abhängigkeit des äußeren Feldes untersucht.
Simuliert wurde im Bereich von $H = 0.0001$ bis $H = 0.5$ auf Gittern der Ausdehnung $L = 24 - 120$.

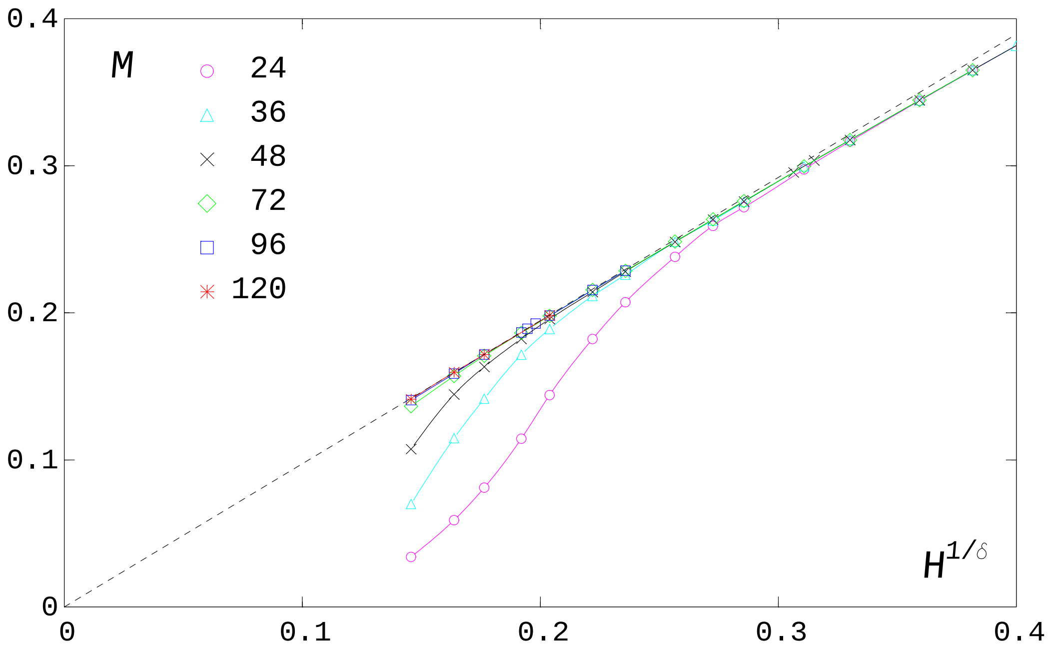


Abbildung 4.2: Magnetisierung bei T_c in Abhängigkeit von $H^{1/\delta}$.

Abbildung (4.2) zeigt das Ergebnis. Wegen der erwarteten Abhängigkeit $M \propto H^{1/\delta}$ wurde M in Abhängigkeit von $H^{1/\delta}$ aufgetragen. Unterschiedliche Plotsymbole stehen dabei für verschiedene Gitter, deren Ausdehnung durch die Zahl neben den einzelnen Symbolen gekennzeichnet ist. In diesem Fit wurden die Daten mit einem

Spline verbunden.
Die Simulationen auf kleinen Gittern zeigten starke Finite Size-Effekte. Oberhalb $H^{1/\delta} > 0.3$ ($\hat{=} H > 0.0032$) nahm das Krümmungsverhalten der Kurve zu, d.h. es traten erste sichtbare Corrections to Scaling auf. Es war daher nicht möglich, für sehr kleine Felder einen Geradenfit in $H^{1/\delta}$ durchzuführen. Dies lag daran, dass die Gitterausdehnungen für $H \lesssim 0.0002$ wohl nicht ausreichten, um die Magnetisierung für unendliches Volumen zu simulieren.
Mit Gleichung (1.59) war aber ein Ansatz zur Berücksichtigung der Korrekturen für größere H möglich. Da für das O(2)-Modell $H^{\omega\nu_c} > H$ ist, und die Korrekturen relativ gering waren, konnte ein in H linearer analytischer Term vernachlässigt werden:

$$M(T_c, H) \;=\; d_c H^{\frac{1}{\delta}}[1 \,+\, d_c^1 H^{\omega\nu_c}] \tag{4.1}$$

mit den Fitparametern $d_c = H_0^{-1/\delta}$ und d_c^1.

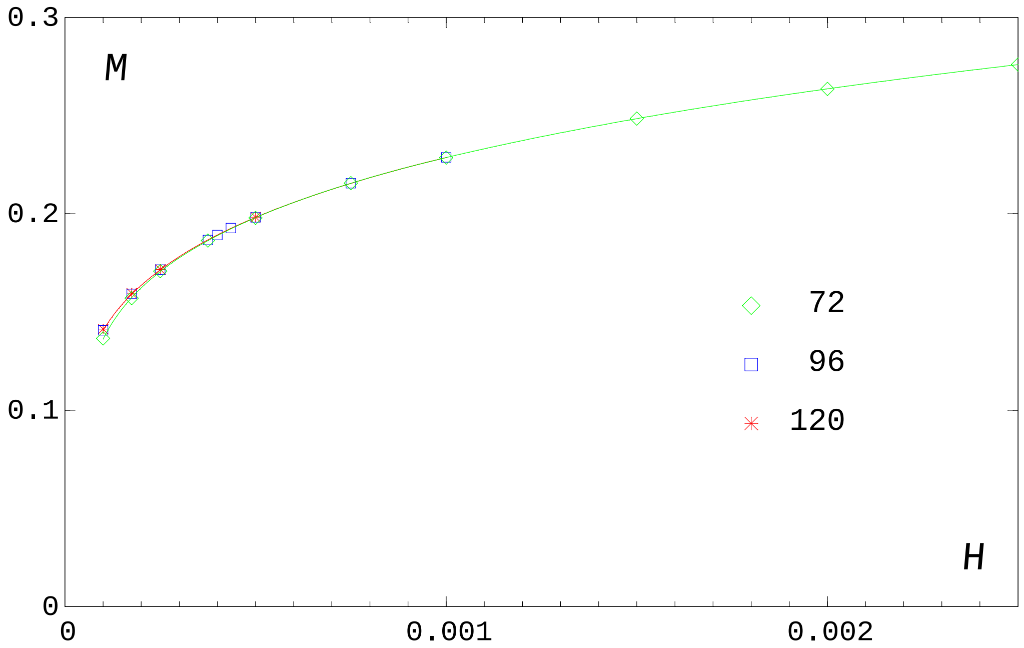


Abbildung 4.3: Magnetisierung bei T_c aus der Multihistogramm-Interpolation für L=72, 96 und 120 in Abhängigkeit von H.

Um den Fit mit Gleichung (4.1) zu erleichtern, wurde die Kurve $M(T_c, H)$ vorher per Multihistogramm-Methode in Abbildung (4.3) ausgewertet. Dabei wurde die Vermutung bestätigt, dass der Bereich um $H \approx 0.0001$ für die verwendeten L-Werte noch Finite Size-Effekte aufwies. Daher konnten erst verschiedene Fits mit Ansatz (4.1) für $H > 0.0002$ durchgeführt werden. Die Daten ließen sich gut fitten und lieferten $d_c = 0.978(2)$ und $d_c^1 = -0.075(5)$ mit $\chi^2/dof \approx 0.5$. Daraus folgte mit $H_0 = d_c^{-\delta}$

$$H_0 \;=\; 1.11(1). \tag{4.2}$$

Damit war eine der beiden Normierungen für das O(2)-Modell festgelegt.
Ließ man neben d_c und d_c^1 auch noch δ als Fitparameter zu, erhielt man wegen der exponentiellen Abhängigkeit in $1/\delta$ einen instabileren Fit, der $\delta = 4.8(1)$ lieferte, was trotz großer Fehler gut zu dem verwendeten Literaturwert passte.

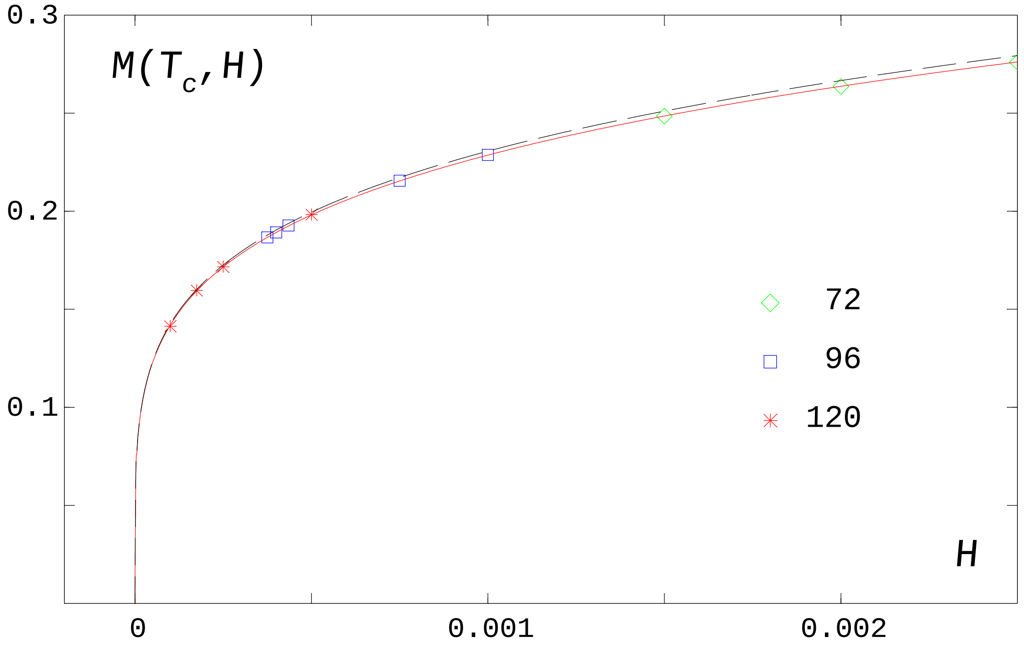


Abbildung 4.4: Magnetisierung bei T_c in Abhängigkeit von H mit Corrections to Scaling (rot) und universellem führenden Term (gestrichelt) aus Gleichung (4.1).

Der führende universelle Anteil $(H/H_0)^{1/\delta}$ der Korrektur wurde als gestrichelte Linie in Abbildung (4.2) eingezeichnet und in Abbildung (4.4) mit den Daten verglichen. Man sieht, dass der Ansatz (4.1) mit den gemessenen Werten gut übereinstimmt, und dass die gefundenen Korrekturen gering sind.
Korrekturen gab es am kritischen Punkt auch für das Finite Size Scaling [1]. Fügt man Gleichung (1.74) die Abhängigkeit vom ersten irrelavanten Exponenten $(-\omega)$ hinzu, folgt für $t = 0$

$$M(T_c, H, V) \;=\; L^{-\beta/\nu} Q_M(HL^{\beta\delta/\nu}, L^{-\omega}) \tag{4.3}$$

mit einer Skalenfunktion Q_M. Die Daten für die verschiedenen Gitter skalierten aber nicht, so dass auch dort Korrekturen berücksichtigt werden mußten [1]. Interessant am kritischen Punkt war darüberhinaus auch das Verhalten der Suszeptibilität und der Korrelationslänge, welche neben Q_M in [1] untersucht wurden.

4.2 Kalte Phase, $T < T_c$

In der kalten Phase erwartet man für kleine H den führenden Term aus Gleichung (1.24), nämlich

$$M(T < T_c, H) \;=\; M(T,0) \;+\; c_1(T)H^{\frac{1}{2}}.$$

Für einen groben Überblick wurden als Beipsiel zuerst bei der Kopplung $J = 0.5$ dieselben Simulationen wie auf der kritischen Isotherme durchgeführt.

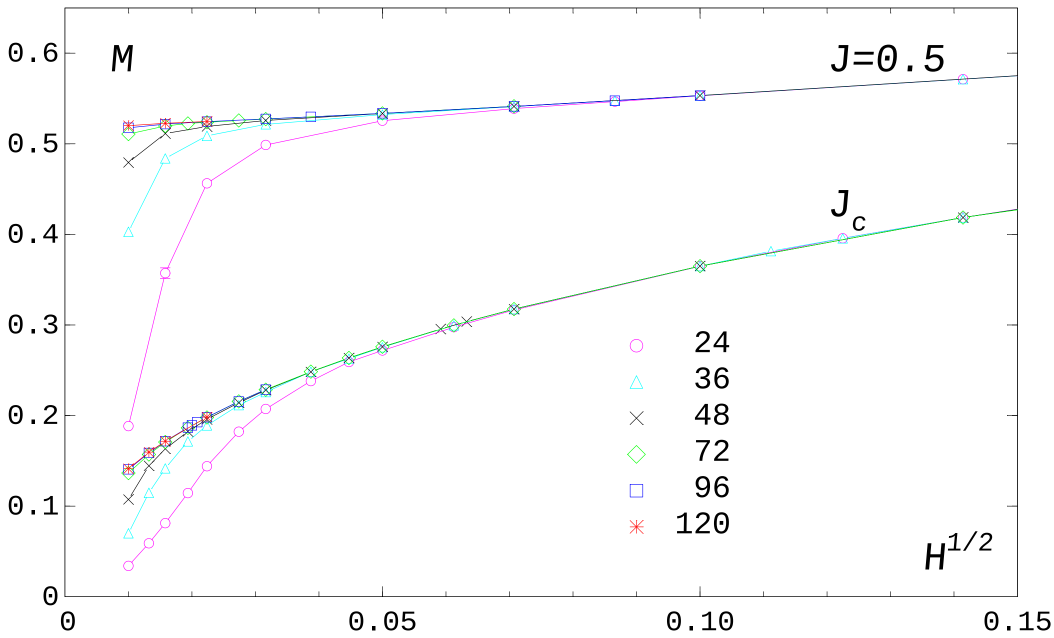


Abbildung 4.5: Magnetisierung bei $J = 0.5$ im Vergleich zu der bei J_c in Abhängigkeit von $\sqrt{H}$.

Abbildung (4.5) zeigt für $J = 0.5$ starke Finite Size-Effekte, stärker als bei der kritischen Kopplung J_c. Diese Effekte waren typisch für die kalte Phase und nahmen mit abnehmender Temperatur zu. Scheinbar zeigte dabei die Magnetisierung von $J = 0.5$ auf einer großen Skala lineares Verhalten in $\sqrt{H}$. Vergrößerung (4.6) für einen kleineren Bereich in H deutete aber auf eine Biegung bei kleinen Feldern hin. Diese Biegung in der Magnetisierung ließ sich bei allen Simulationen für konstante

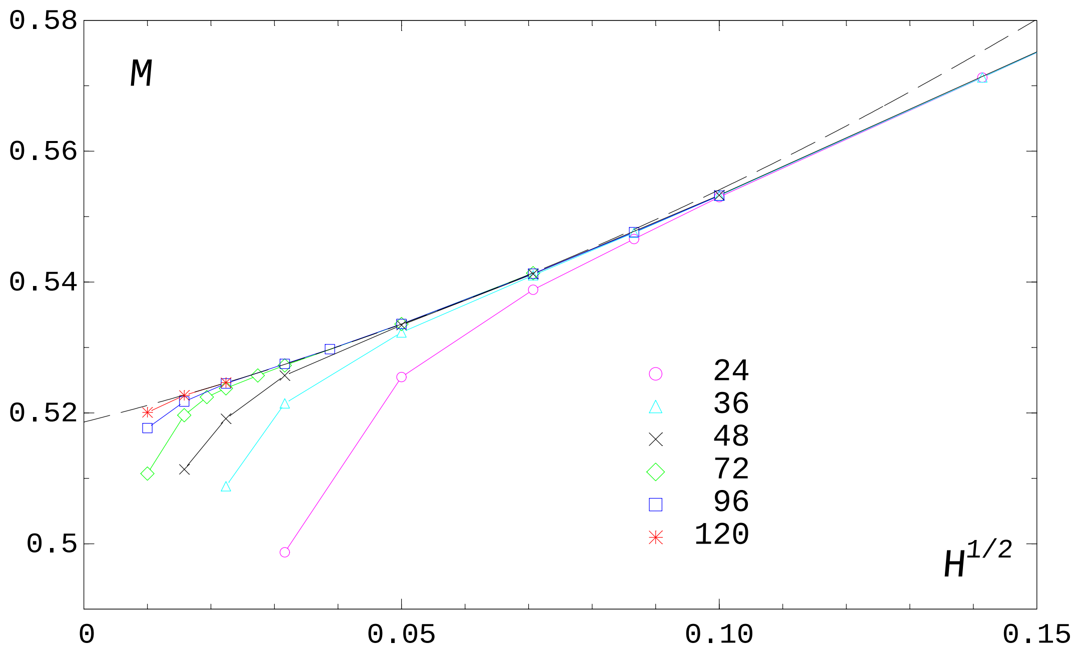


Abbildung 4.6: Magnetisierung bei $J = 0.5$ als Vergrößerung mit Parabelfit in Abhängigkeit von $\sqrt{H}$.

$T < T_c$ in Abhängigkeit von $\sqrt{H}$ feststellen. Daher war es nötig aus Gleichung (1.24) auch den nächsten führenden Term $c_2(T)H$ mit einzubeziehen, um den Ordnungsparameter in der Nähe von $H = 0$ zu beschreiben.
Mit diesem quadratischen Ansatz konnte die Magnetisierung für $J = 0.5$ gut gefittet werden. Man erhielt nach Auswertung der Gitter $L = 72, 96, 120$ per Multihistogramm-Methode im Bereich von $H = 0.0008$ bis $H = 0.0075$ das Ergebnis

$$M(J = 0.5, H) \; = \; 0.5186(01) \, + \, 0.244(02)H^{\frac{1}{2}} \, + \, 1.11(02)H \tag{4.4}$$

mit $\chi^2/dof = 0.39$. Mit dieser Gleichung war für $J = 0.5$ die Magnetisierung sowohl für den Fall $H = 0$ als auch im Bereich $H < 0.0008$ bekannt. Simulationen für so kleine H-Werte hätten nur durch Gitter mit noch viel größeren Ausdehnungen als den verwendeten einen Wert ohne Finite Size-Effekt geliefert. Einige Versuche mit einer Gitterausdehnung von $L = 160$ zeigten weiterhin Finite Size-Effekte.
Das gefundene Verhalten der Magnetisierung für $J = 0.5$ war sowohl mit den Daten für die longitudinale Suszeptibilität $\chi_L = \partial M/\partial H$ als auch für die transversale Suszeptibilität $\chi_T = M/H$ gut verträglich. Beide erhielt man aus (4.4) in Abhängigkeit von $1/\sqrt{H}$.

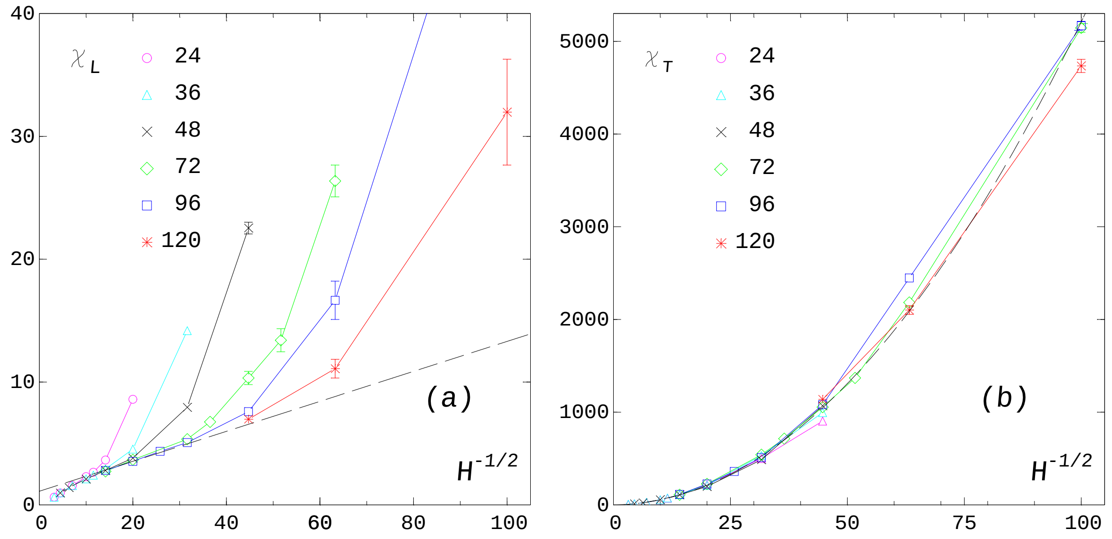


Abbildung 4.7: Longitudinale (a) und transversale (b) Suszeptibilität bei $J = 0.5$ in Abhängigkeit von $1/\sqrt{H}$ mit einfachen Verbindungen. Die gestrichelten Linien zeigen jeweils die Suszeptibilitäten aus der gefundenen Parabel für die Magnetisierung.

Die longitudinale Suszeptibilität zeigte darüberhinaus, dass es für kleine Felder aufwändig war, den $V \to \infty$ - Grenzfall zu erreichen. Glaubte man bei der Magnetisierung innerhalb der Fehler bereits an eine Übereinstimmung der Daten von den beiden größten Gittern, so waren deren Suszeptibilitäten verschieden. Anhand der transversalen Suszeptibilität sah man ferner, dass bei kleinen Feldern kleine Fluktuationen in der Ordnung der Gittergrößen auftraten, ein Zeichen dafür, dass dort die Fehler unterschätzt wurden.

Nach diesem ausführlichen Beispiel anhand von $J = 0.5$ waren Parabelfits bei einer ganzen Reihe anderer Kopplungen nötig, um z.B. mit Hilfe ihrer Werte für die Magnetisierung bei $H = 0$ das Skalenverhalten

$$M \propto (T_c - T)^\beta$$

auf der Koexistenzlinie zu überprüfen. Wegen der starken Krümmung dieser Relation für Temperaturen nahe an der kritischen war es nötig, auch dort zu simulieren. Betrachtet wurden daher nahe J_c die Kopplungen $J = 0.46$, 0.462, 0.465, 0.47 und weiter entfernt $J = 0.5$, 0.55, 0.6. Alle Daten wurden per Multihistogramm-Methode ausgewertet, und das Erreichen des Limes $V \to \infty$ mit den Daten für die Magnetisierung und für die Suszeptibilität überprüft.

Anhand der gefundenen Daten in Tabelle (4.2) konnte man gut sehen, wie der Bereich, in dem ein Parabelfit möglich war, in Richtung größerer Kopplungen wuchs.

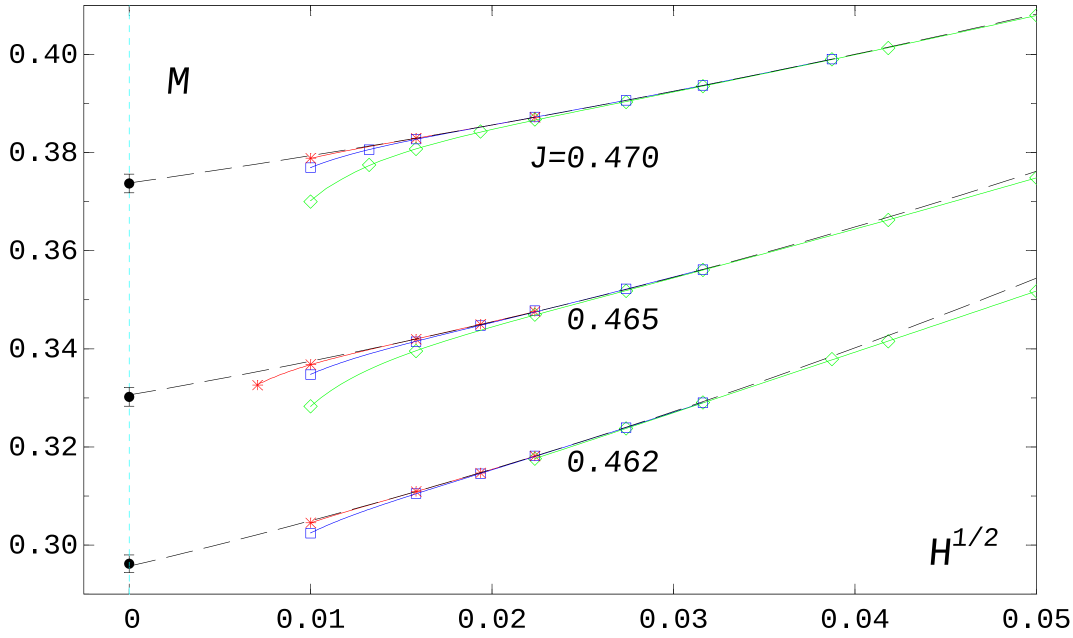


Abbildung 4.8: Die Magnetisierung in der kalten Phase in Abhängigkeit von $\sqrt{H}$ bei fixem $J = 0.462, 0.465, 0.47$. Dabei wurde per Parabelfit (gestrichelt) auf den Bereich bis $M(T, H = 0)$ extrapoliert; die ausgefüllten Punkte zeigen darüberhinaus einen alternativ berechneten Wert für $M(T, H = 0)$ aus der Chiralen Störungstheorie.

$J = 1/T$	$M(T,0)$	$c_1(T)$	$c_2(T)$	$10^4 \cdot H$	χ^2/dof
0.462	0.2957(03)	0.865(30)	6.18(82)	2-5	0.008
0.465	0.3306(02)	0.633(17)	5.58(36)	3-10	0.019
0.470	0.3738(01)	0.526(03)	3.24(05)	3-15	0.05
0.500	0.5186(01)	0.244(02)	1.11(02)	8-75	0.39
0.550	0.6303(01)	0.157(01)	0.38(01)	10-50	0.66
0.600	0.6925(01)	0.133(01)	0.09(01)	16-75	0.18

Tabelle 4.2: Parameter der Magnetisierung mit Ansatz $M(T, 0) + c_1 H^{1/2} + c_2 H$.

Man sah ferner, dass der quadratische Anteil mit zunehmender Kopplung bis $J = 0.6$ beinahe verschwand, und die Steigung der Kurve systematisch flacher wurde. Ein Geradenfit bei $J = 0.6$ war mit gleicher Genauigkeit ebenfalls möglich. Der gewählte Ansatz funktionierte dagegen bei $J = 0.46$ gar nicht. Dies lag einfach an der Tatsache, dass $J = 0.46$ zu nahe bei J_c lag. Zur Erinnerung sei nur erwähnt, dass $J_c = 0.454165$ ist. Abbildung (4.9) zeigt, dass der für die großen Kopplungen in der fünften Spalte von Tabelle (4.2) verwendete Fitbereich kleiner als möglich war.

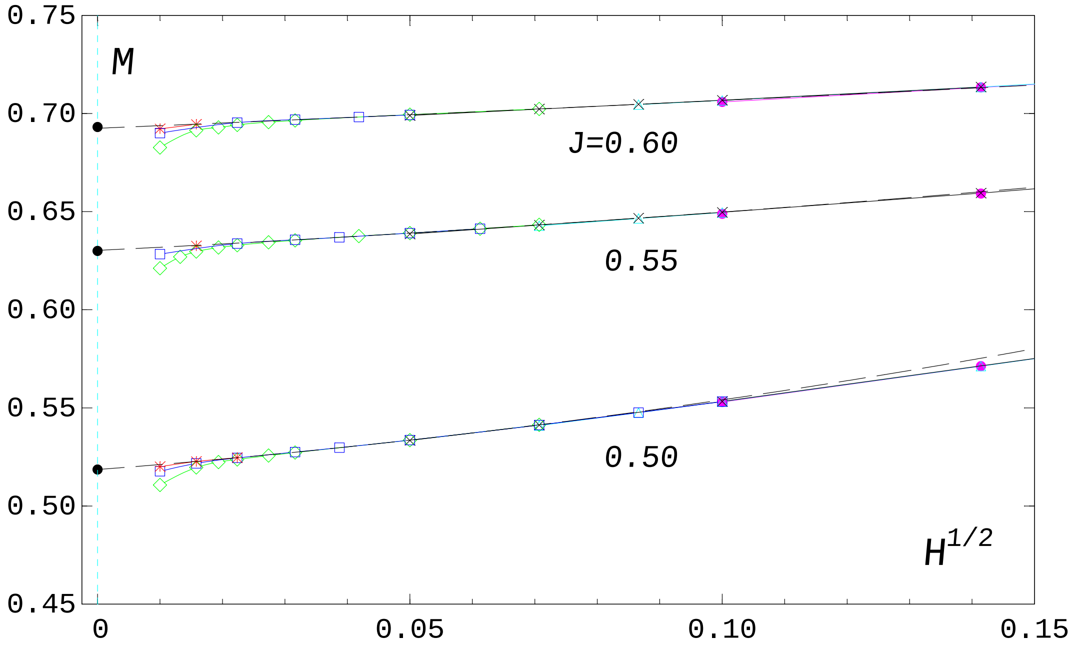


Abbildung 4.9: Die Magnetisierung in der kalten Phase in Abhängigkeit von $\sqrt{H}$ bei fixem $J = 0.5$, 0.55, 0.6. Ausgefüllte Punkte zeigen den störungstheoretischen Wert für $M(T, H = 0)$.

Daten für größere Felder lagen ebenfalls gut auf den Kurven. Im Fall von $J = 0.6$ lag die obere Grenze der Anwendbarkeit des quadratischen Ansatzes bei $H \approx 0.01$ ($\hat{=}\ H^{1/2} \approx 0.1$).
Diese Ergebnisse erforderten großen Rechenaufwand, und es bestand die Gefahr, wenn man zu wenig Daten über die korrekte Magnetisierung in der Nähe von $H \approx 0.0001$ vorliegen hatte, dass Extrapolationen zu kleine Werte für $M(T, 0)$ liefern konnten.

Eine Alternative zur Berechnung und Überprüfung dieser Werte stellten die Gleichungen der Chiralen Störungstheorie aus Kapitel 1.4 dar. Dort ließ sich

$$M(T,0) \;=\; \frac{\Sigma}{\sqrt{J}} \tag{4.5}$$

mit Hilfe von

$$M(T,H,L) \;=\; \frac{\Sigma}{\sqrt{J}} u[\rho_1\eta + 2\rho_2\alpha^2] \tag{4.6}$$

bei konstantem H aus der Volumenabhängigkeit der Magnetisierung berechnen. Dabei ist $u = \rho_1 \Sigma H V/\sqrt{J}$, $\alpha = 1/(F^2 L)$ und $\eta = I_1(u)/(u\, I_2(u))$ mit den Notationen aus Kapitel 1.4 . Die Volumenabhängigkeit steckt also in α, u und ρ_1. Diese Berechnung von $M(T,H,L)$ ist störungstheoretisch nur zulässig unter der Bedingung

$$H\frac{\Sigma}{\sqrt{J}} \lesssim \left(\frac{F}{L}\right)^2 . \tag{4.7}$$

Nun wurde bei konstanter Temperatur und konstantem Feld die Magnetisierung in Abhängigkeit der Gittergröße gemessen. Nach (4.7) kamen dabei nur sehr kleine Felder in Frage. Versuche bei $H = 0.0001$ und $H = 0.0005$ mit $J = 0.46, 0.465, 0.47$ und 0.5 zeigten, dass Fits bei $H = 0.0001$ kleinere Fehler in den Parametern Σ und F hatten bei kleinerem χ^2/dof. Außerdem sind kleine Felder im Sinne der Störungstheoretie sinnvoller. Daher wurden bei allen extrapolierten Kopplungen Fits bei $H = 0.0001$ für $L =$ 8, 10, 12, 16, 20, 24, 30, 36, 40, 48, 64, 72, 96 und 120 durchgeführt. Dabei zeigte sich, dass die beiden Fitparameter relativ konstant blieben. Dadurch konnte man die Bedingung (4.7) nach einem L_{max} auflösen, welches die obere Schranke für die Gitterausdehnung der folgenden Fits angeben sollte

$$L_{max} \approx F\sqrt{\frac{\sqrt{J}}{H\Sigma}}. \tag{4.8}$$

$J = 1/T$	L	L_{max}(T)	$\Sigma/\sqrt{J}$	χ^2/dof	$M(T,0)$
0.462	12-36	38	0.2962(18)	1.03	0.2957(03)
0.465	12-40	42	0.3302(19)	0.92	0.3306(02)
0.470	8-40	44	0.3737(19)	1.16	0.3738(01)
0.500	16-48	57	0.5186(12)	1.29	0.5186(01)
0.550	12-56	63	0.6300(19)	0.69	0.6303(01)
0.600	8-64	67	0.6931(07)	0.87	0.6925(01)

Tabelle 4.3: Störungstheoretischen Werte der Magnetisierung für $M(T, H \to 0)$ bei $H = 0.0001$. Die zweite Spalte zeigt dabei den verwendenten L-Bereich, während Spalte 5 noch einmal zum Vergleich das Ergebnis der durchgeführten Parabelfits wiederholt.

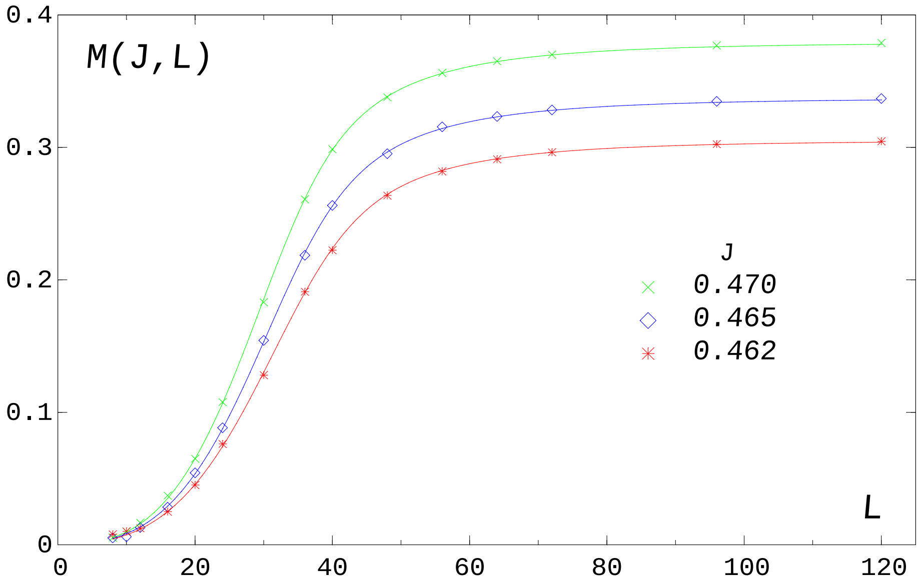


Abbildung 4.10: Die Magnetisierung in der kalten Phase bei konstantem Feld $H = 0.0001$ in Abhängigkeit vom Gitter L bei fixem $J = 0.462, 0.465, 0.47$. Alle Kurven wurden dabei per ϵ-Expansion aus der Chiralen Störungstheorie gewonnen.

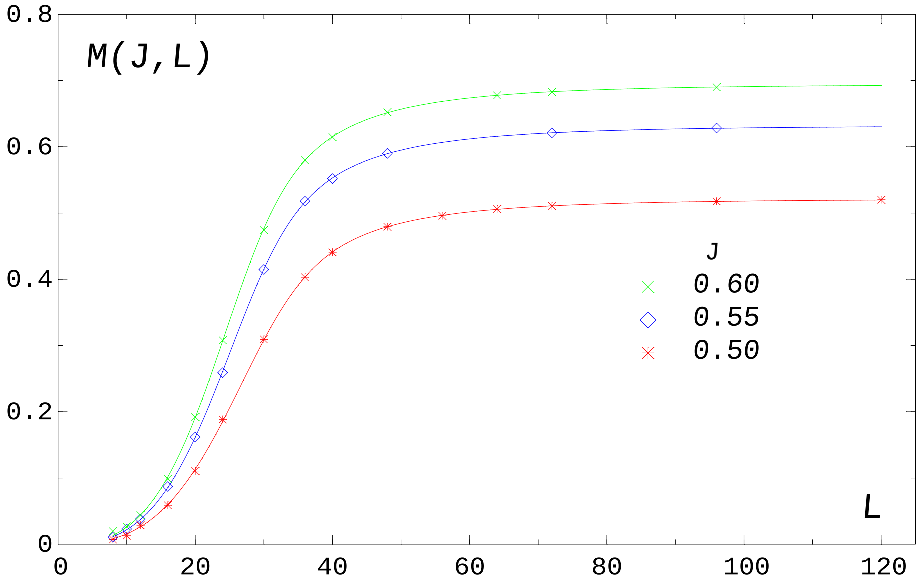


Abbildung 4.11: Die Magnetisierung in der kalten Phase bei konstantem Feld $H = 0.0001$ in Abhängigkeit vom Gitter L bei fixem $J = 0.5, 0.55, 0.6$.

Diese Fits, dargestellt in den Abbildungen (4.10) und (4.11), funktionierten gut, so dass auch Gitter jenseits der oberen Schranke $L_{max}(T)$ auf den Kurven lagen. Wählte man aber L_{max} als obere Grenze und variierte innerhalb dieser Schranke den Fitbereich, indem z.B. die beiden kleinsten Gitter vernachlässigt wurden, so entstand ein Variationsfehler, der größer war als die Fitfehler. Dadurch waren die Abschätzungen der CPT ungenauer als die extrapolierten Werte der Parabelfits. Tabelle (4.3) zeigt aber eine sehr gute Übereinstimmung zwischen Chiraler Störungstheorie und den Parabelfits der Magnetisierung. Daher sollten auch beide Ergebnisse zur Bestimmung der Normierungstemperatur T_0 in der Relation

$$M(T,0) \; = \; \left(-\frac{T-T_c}{T_0}\right)^{\beta} \tag{4.9}$$

mit einfließen. Aus diesem Grund konnte man den einfachen Mittelwert aus der dritten und fünften Spalte in Tabelle (4.3) mit mittlerem Fehler bilden.

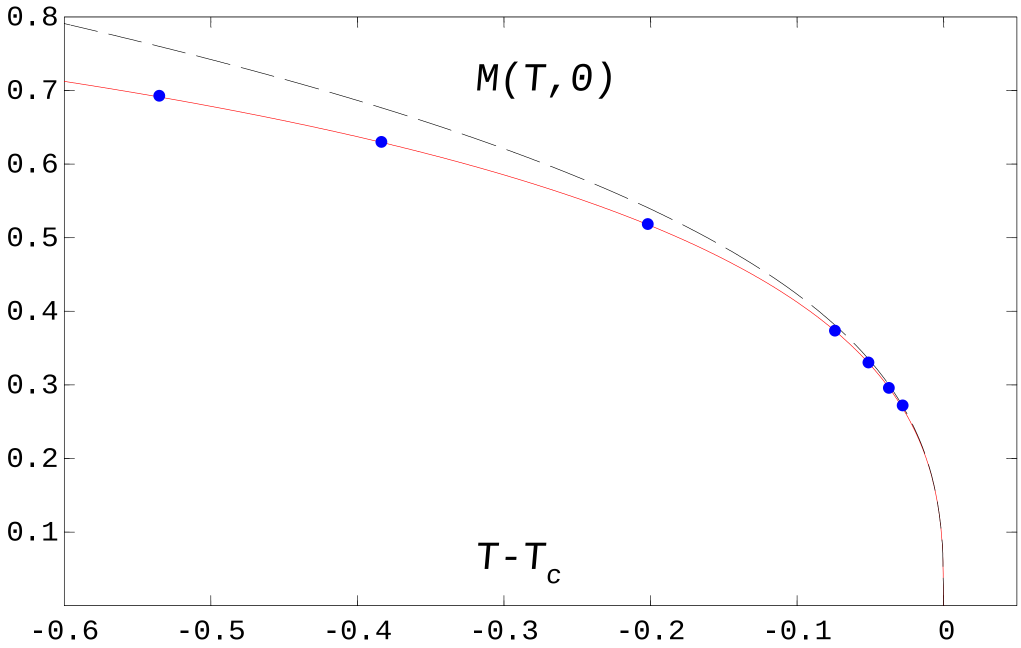


Abbildung 4.12: Magnetisierung bei $H = 0$ mit Corrections to Scaling (rot). Die gestrichelte Linie zeigt dabei den führenden universellen Anteil.

Benutzte man alle Daten, so sollte in doppellogarithmischer Form aus der obigen Relation ein lineares Verhalten der Form

$$\log\{M(T,0)\} \; = \; \beta \, \log\{T_c - T\} - \beta \, \log\{T_0\} \tag{4.10}$$

auftreten. Dies war aber nicht der Fall, denn die gefundene Kurve zeigte noch stärkere Corrections to Scaling als im Fall $M(T_c, H)$. Man konnte wieder versuchen, diese Abweichungen zu parametrisieren. Aus Gleichung (1.60) erhielt man den Ansatz

$$M(T \lesssim T_c, H=0) \;=\; B(T_c - T)^\beta [1 \;+\; b_1 (T_c - T)^{\omega\nu} \;+\; b_2 (T_c - T)]. \tag{4.11}$$

Dabei wurde ein weiterer Term aufgrund stärkerer Abweichungen im Vergleich zu den Fits auf der kritischen Isotherme berücksichtigt. Da $\omega\nu \approx 0.5$, ist der nächste Term $(T_c - T)^{2\omega\nu}$ in der Entwicklung nach $\omega\nu$ dem ersten analytischen Term $(T_c - T)$ ungefähr gleichwertig. Man erhielt für einen Fit mit $\chi^2/dof = 0.26$ das Ergebnis $B = 0.945(5), b_1 = -0.053(23)$ und $b_2 = -0.098(23)$. Mit $T_0 = B^{-1/\beta}$ folgte

$$T_0 \;=\; 1.18(2). \tag{4.12}$$

Damit wurde auch die zweite Normierung für das O(2)-Modell festgelegt.

4.3 Heiße Phase, $T > T_c$

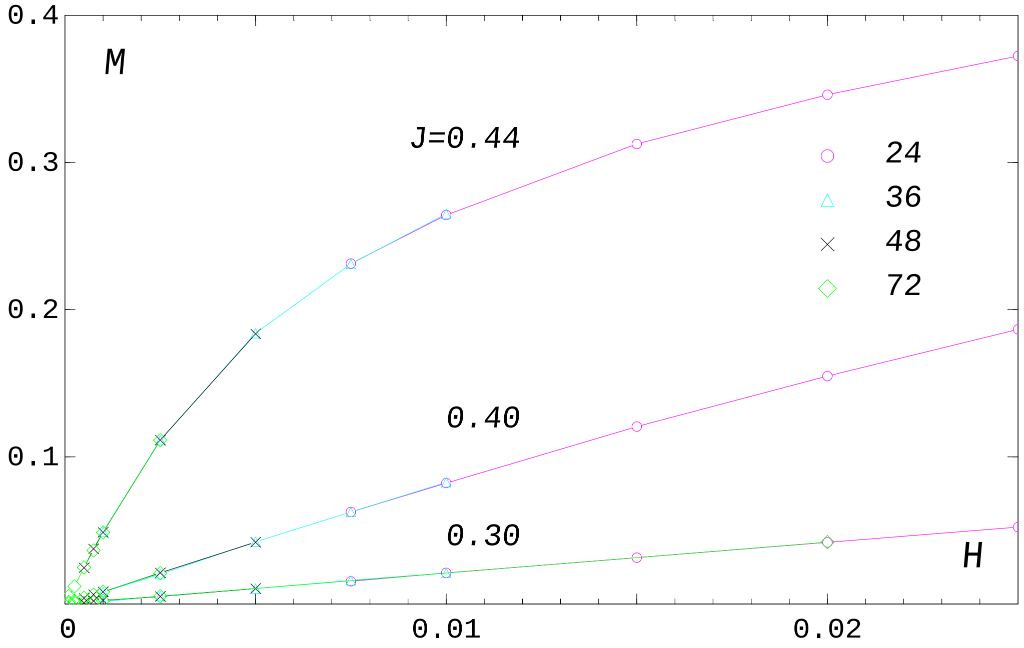


Abbildung 4.13: Magnetisierung als Funktion von H in der heißen Phase mit einfachen Verbindungen der Datenpunkte.

In der heißen Phase ($T > T_c$) des O(2)-Modells erwiesen sich die Finite Size-Effekte als unbedeutender. Dort gab es in der Nähe von $H = 0$ kaum Unterschiede zwischen den Daten großer Gitter, so dass Gitterausdehnungen von $L = 48$ und 72 bis $H = 0.0001$ ausreichend waren. Dabei sollte sich in erster Nährung in der Nähe von $H = 0$ das Verhalten

$$M(T > T_c, H) \; \propto \; H \tag{4.13}$$

einstellen. Diese Gleichung erhält man direkt aus der Taylorentwicklung von M in der Nähe von $H = 0$

$$\begin{aligned} M(T > T_c, H \gtrsim 0) \quad &\approx \quad M(T, H = 0) + \left(\frac{\partial M}{\partial H}\right)_{H=0} H \; + \; ... \\ &= \quad \chi_L(0)\, H \; + \; ... \end{aligned} \tag{4.14}$$

mit $M(T, H = 0) = 0$. Gleichzeitig nimmt für steigende Temperatur der Einfluss des Feldes auf die Magnetisierung ab, wodurch diese Entwicklung auch für größere H ihre Gültigkeit behält.
Diesen Zusammenhang zeigt Abbildung (4.13). Während für $J = 0.44$ ein lineares Verhalten nur für $H \lesssim 0.001$ zu erkennen war, reichte es bei $J = 0.3$ über den gesamten Fitbereich. Die Suszeptibilität war dabei erwartungsgemäß konstant.

4.4 Verschwindendes Magnetfeld, H=0

Nach der Betrachtung der kalten Phase für $H \neq 0$ und der Extrapolation von $M(T < T_c; H)$ nach $M(T < T_c; H = 0)$ stellt sich die Frage, ob es nicht möglich wäre, $M(T < T_c; H = 0)$ direkt bei $H = 0$ zu berechnen.
Für $H = 0$ kann sich das System in der kalten Phase im thermodynamischen Limes (i.e. $V \to \infty$) in eine beliebige Richtung spontan magnetisieren. Diese Magnetisierung hat den Betrag $M^*(V \to \infty) \neq 0$. In endlichem Volumen für $H = 0$ ist

$$M \; = < S_{||} > = \; 0. \tag{4.15}$$

Daher wird für $H = 0$ auf dem Gitter ein approximierter Ordnungsparameter M^* definiert durch

$$M^* \; = \; \frac{1}{V} < | \sum_i \vec{S}_i | > . \tag{4.16}$$

Gemessen wird ein Wert $\tilde{M} = M^* \cdot \cos\vartheta$ mit $\vartheta \in [0, 2\pi]$ ungefähr gleichverteilt. Betrachtet man den absoluten Betrag $|\tilde{M}|$, so ist $M^* = |\tilde{M}| \cdot \pi/2$.

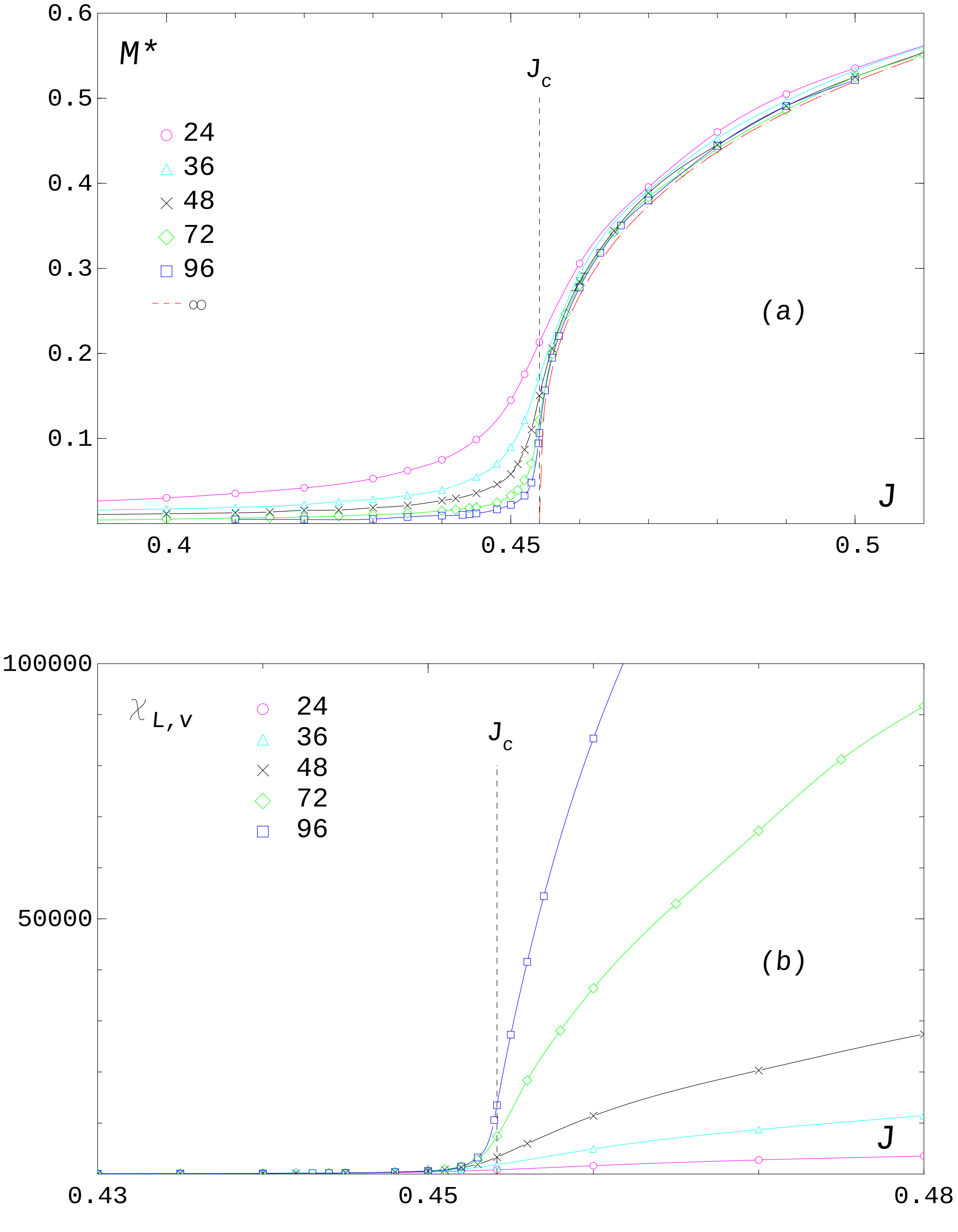


Abbildung 4.14: Magnetisierung M^* und abgewandelte Suszeptibilität $\chi_{L,V}$ bei $H = 0$ in Abhängigkeit der Gitterabstände L und der Kopplung J mit Splineverbindung. Die rote gestrichelte Linie bei der Magnetisierung zeigt das extrapolierte Ergebnis aus Kapitel 4.2.

Abbildung (4.14a) zeigt sowohl in der heißen als auch der kalten Phase starke Finite Size-Effekte in M^*. Dabei näherte sich M^* im Gegensatz zu $H \neq 0$ dem Wert $M(T = 0; V \to \infty)$ von oben. In Abbildung (4.14b) ist die Ausprägung einer Divergenz der Suszeptibilität $\chi_{L,V}$ für $J = J_c$ für $V \to \infty$ bei großen Gittern gut erkennbar. Dabei wurde aufgrund der Tatsache, dass $< \vec{S} >= 0$ ist, die Suszeptibilität als

$$\chi_{L,V} \;=\; V < M^{*2} > \tag{4.17}$$

definiert.
Die gestrichelte rote Linie in Abbildung (4.14a) zeigt das Ergebnis der Extrapolation für $H = 0$ aus Kapitel 4.2. Wie erwartet liegt diese Kurve ein wenig unter der spontanen Magnetisierung M^* des größten Gitters, so dass im Grenzfall $L \to \infty$ Konvergenz vorliegen sollte. Die Annährung von oben ist dabei eine Folge der verwendenten Definition über den Absolutbetrag. Das Ergebnis für Simulationen bei $H = 0$ ist also mit dem Ergebnis aus Kapitel 4.2 verträglich.

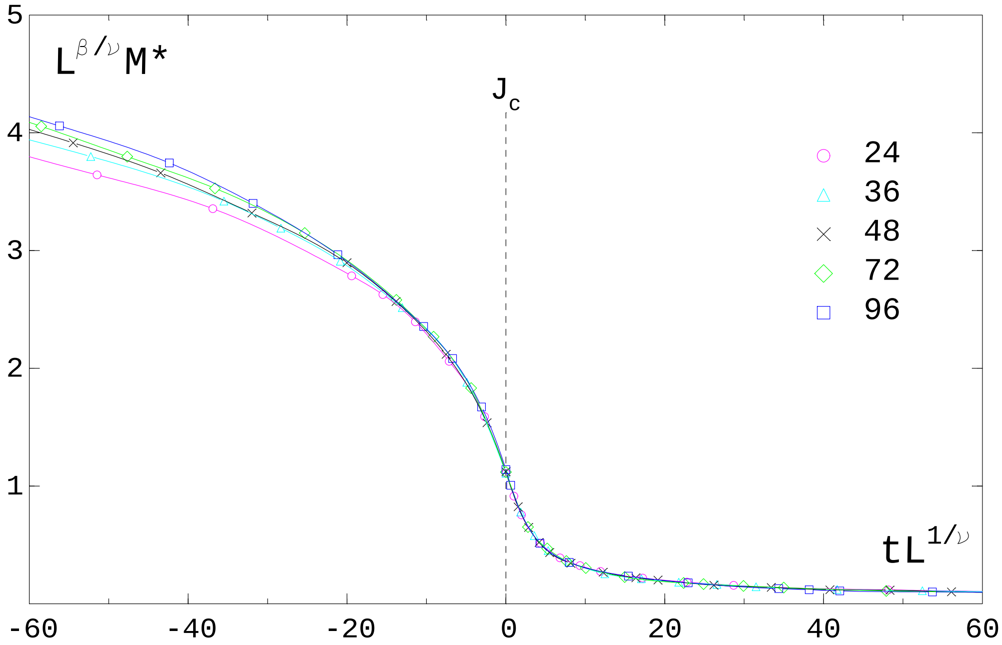


Abbildung 4.15: Finite Size Scaling bei $H = 0$.

Abbildung (4.15) zeigt das aus Gleichung (1.74) folgende Finite Size Scaling-Verhalten für die Magnetisierung

$$M^* \;=\; L^{-\frac{\beta}{\nu}} Q_{M^*}(tL^{\frac{1}{\nu}}). \tag{4.18}$$

In der Nähe von J_c und weit in die heiße Phase hinein funktionierte diese Gleichung gut. In der kalten Phase sah man dahingegen schon früh erste Korrekturen zu Q_{M^*}.

Kapitel 5

Die Skalenfunktion f_G des O(2)-Modells

Nachdem das O(2)-Modell am kritischen Punkt T_c, bei verschwindendem Feld $H = 0$, in der kalten Phase $T < T_c$ und in der heißen Phase $T > T_c$ untersucht wurde und im Rahmen dieser Betrachtungen die beiden Normierungskonstanten H_0 und T_0 bestimmt wurden, sollte nun die Skalenfunktion f_G der O(2)-Universalitätsklasse bestimmt werden

$$Mh^{-1/\delta} \;=\; f_G(t/h^{1/\beta\delta}). \tag{5.1}$$

Um die Form von f_G zu bestimmen, war es nötig, die gesammelten Daten der kalten und heißen Phase als Zuordnung

$$t/h^{1/\beta\delta} \longrightarrow Mh^{-1/\delta}$$

aufzutragen. Dabei sollten in der kalten Phase die durch den Goldstone-Effekt gewonnenen Parabeln für $H \to 0$ mit verwendet werden. Diese Daten sollten skalieren und die Form f_G ergeben.

Abbildung (5.1a) zeigt gut, dass die gefundenen Kurven des Magnetisierungsverhaltens von $J = 0.462, 0.465, 0.47, 0.5$ und $J = 0.55$ nicht skalieren. Abbildung (5.1b) zeigt dazu den aufwändigen Versuch, viel näher bei $th^{-1/\beta\delta} = 0$ zu simulieren. Dafür wurden Simulationen mit $J \leq 0.46$ und $H \leq 0.001$ durchgeführt (schwarze Sterne). Eine Analyse dieser Ergebnisse zeigte aber, dass selbst diese Daten nicht skalierten. Daher war es nötig, mit Hilfe der einzelnen Kurven konstanter Kopplung diese Abweichungen zu beheben und die Skalenfunktion der kalten Phase zu berechnen.

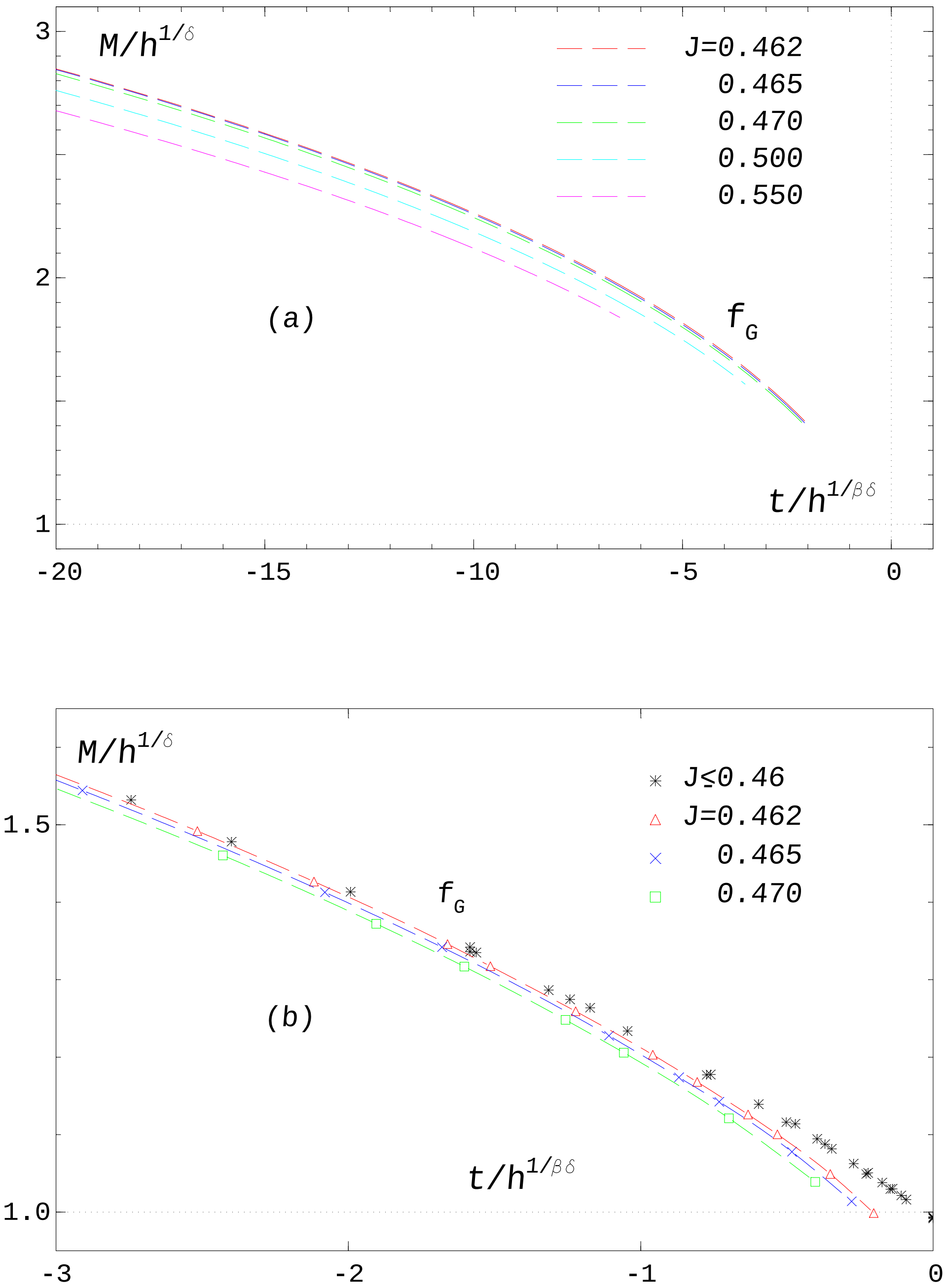


Abbildung 5.1: Die Skalenfunktion des O(2)-Modells in der kalten Phase mit Abweichungen vom Skalenverhalten. Abbildung (a) zeigt die gefundenen Kurven für konstante J, während in (b) der Bereich in der Nähe von $th^{-1/\beta\delta} = 0$ mit zusätzlichen Datenpunkten gezeigt wird.

Zur Berücksichtigung der Korrekturen wurde erneut die erste irrelevante Skalenvariable mit einbezogen. Aus Gleichung (1.55) ergibt sich für $u_h = c_H H$ und $u_t = c_t t$ die freie Energiedichte

$$\begin{aligned} f_s(c_H H, c_t t, u_3) &= (c_H H)^{1+\frac{1}{\delta}}\, f_s((c_H H)^{-\nu_c/\nu} c_t t, (c_H H)^{\omega\nu_c} u_3) \\ &= a_1 H^{1+\frac{1}{\delta}}\, f_s(a_2 z, a_3 H^{\omega\nu_c}) \end{aligned} \tag{5.2}$$

mit der Skalenvariablen $z \equiv th^{-1/\beta\delta}$ $[\nu_c/\nu = 1/\beta\delta]$ und drei vereinfachenden Konstanten a_1, a_2 und a_3. Für die Magnetisierung $M = -\partial f_s/\partial H$ gilt

$$\begin{aligned} M &= -a_1(1+\frac{1}{\delta})\, H^{\frac{1}{\delta}}\, f_s(a_2 z, a_3 H^{\omega\nu_c}) \\ &\quad - a_1 H^{1+\frac{1}{\delta}} \left[\frac{\partial f_s}{\partial(a_2 z)}\, a_2 t h^{-\frac{1}{H_0 \beta\delta}-1} \left(-\frac{1}{\beta\delta}\right) + \frac{\partial f_s}{\partial(a_3 H^{\omega\nu_c})}\, H^{\omega\nu_c - 1} a_3\, \omega\nu_c \right] \\ &= H^{\frac{1}{\delta}}\, \Psi_1(z, H^{\omega\nu_c}) + H^{\frac{1}{\delta}}\, \Psi_2(z, H^{\omega\nu_c})\, z + H^{\frac{1}{\delta}}\, \Psi_3(z, H^{\omega\nu_c})\, H^{\omega\nu_c} \\ &= h^{\frac{1}{\delta}}\, \Psi(z, h^{\omega\nu_c}). \end{aligned} \tag{5.3}$$

Daher erhält man eine erweiterte Form von Gleichung (5.1)

$$Mh^{-1/\delta} = \Psi(th^{-1/\beta\delta}, h^{\omega\nu_c}) \tag{5.4}$$

mit der zusätzlichen Abhängigkeit von $h^{\omega\nu_c}$ zur Kontrolle der Corrections to Scaling. Entwickelt man die Funktion Ψ in $h^{\omega\nu_c}$, so ist

$$Mh^{-1/\delta} = f_G(th^{-1/\beta\delta}) + h^{\omega\nu_c} f_G^{(1)}(th^{-1/\beta\delta}) + h^{2\omega\nu_c} f_G^{(2)}(th^{-1/\beta\delta}) + \ldots . \tag{5.5}$$

Damit ist es in der kalten Phase möglich, bei konstantem $z = th^{-1/\beta\delta}$ durch quadratische oder lineare Fits in $h^{\omega\nu_c}$ auf f_G zu extrapolieren. Diese Methode wurde mit unterschiedlichem Erfolg für $z \leq -2.0$ durchgeführt: Für $z \lesssim -10.0$ hatte ein quadratischer Ansatz große Fehler. Bis $z \lesssim -3.5$ lieferte ein quadratischer Fit gute Resultate, und im Bereich $-3.5 \leq z \leq -2$ wurde ein lineare Ansatz verwendet. Damit erhielt man die extrapolierten Werte von f_G bis $z = -2.0$. Für größere z lagen Kurven mit konstanter Kopplung zu dicht beieinander, um auch dort eine Extrapolation durchzuführen. Dieser Bereich konnte aber mit Hilfe der Normierung $f_G(z = 0) = 1$ in die heiße Phase hinein überbrückt werden.
Die heiße Phase ist in Abbildung (5.2) dargestellt. Dort stellte sich heraus, dass Daten aus dem Bereich $J \gtrsim 0.43$ und $H \lesssim 0.001$, die keine Finite Size-Effekte mehr aufwiesen, skalierten, so dass keine Korrektur nötig war. Die Kurve von $J = 0.4$ skalierte dagegen nicht mit diesen Daten, da $J = 0.4$ bereits zu weit von der kritischen Region entfernt war.
Durch die Extrapolation der f_G-Werte in der kalten Phase, den Messpunkten in der

heißen Phase und der Normierung für $z = 0$ konnte die Skalenfunktion f_G interpoliert werden. Abbildung (5.3) zeigt das Ergebnis.
Diese interpolierte Kurve von f_G konnte ohne Probleme in die Widom-Griffiths-Form (1.63) durch die Gleichungen

$$y \;=\; f_G^{-\delta} \quad \text{und} \quad x \;=\; (t/h^{1/\beta\delta}) \cdot f_G^{-1/\beta} \tag{5.6}$$

übersetzt werden. Dann war es möglich, Funktionen $x_1(y)$ und $x_2(y)$ für die kalte und die heiße Phase zu bestimmen und das Ergebnis mit dem aus der Hochtemperatur-Entwicklung [14] zu vergleichen. Dieser Vergleich wurde in [1] durchgeführt.

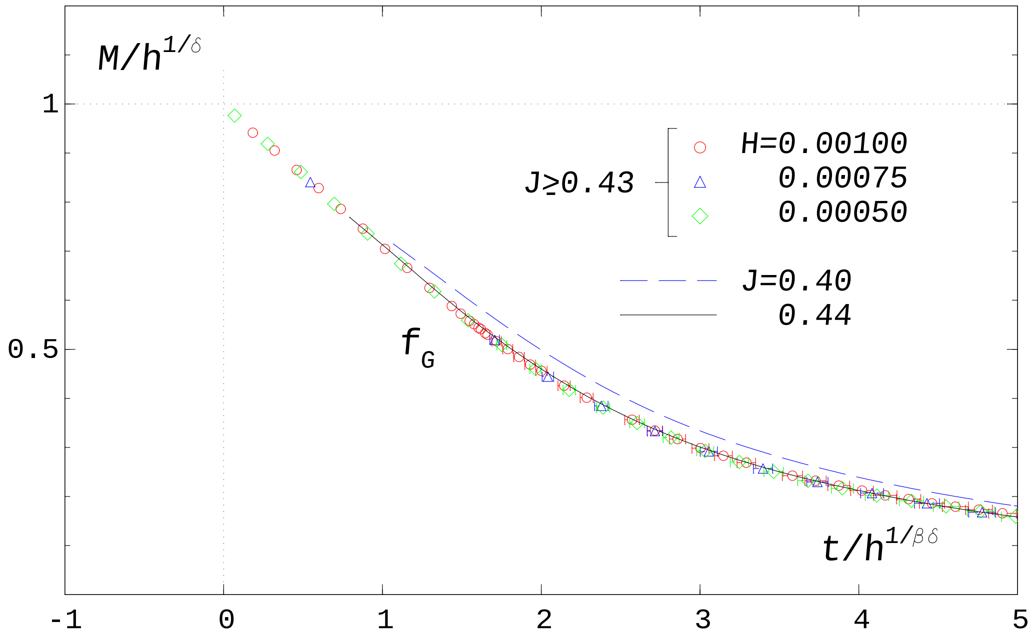


Abbildung 5.2: Skalenfunktion des O(2)-Modells für die heiße Phase.

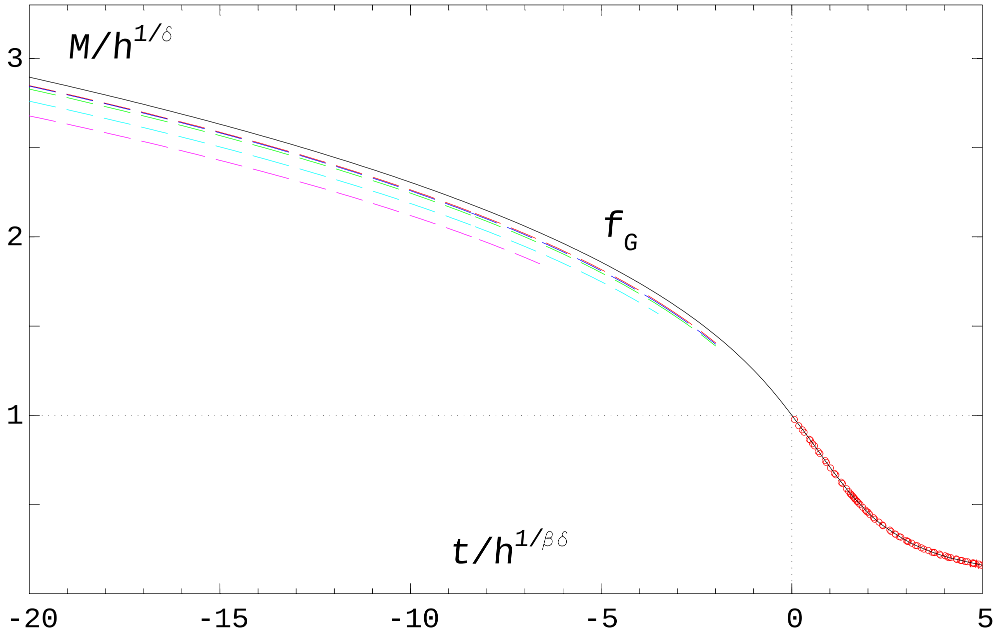


Abbildung 5.3: Skalenfunktion des O(2)-Modells in korrigierter Form (schwarze Linie), interpoliert aus der korrigierten kalten Phase, der Normierung $f_G(0) = 1$ und Datenpunkten in der heißen Phase (rote Kreis).

5.1 Vergleich der O(2)-Skalenfunktion mit O(4) und QCD-Daten

Die im letzten Abschnitt durchgeführten Untersuchungen über das O(2)-Modell wurden bereits im O(4)-Fall durchgeführt [2], da jenes Modell die QCD im Kontinuum widerspiegeln soll. Aufgrund vernachlässigbarer Corrections to Scaling war deren Auswertung einfacher.

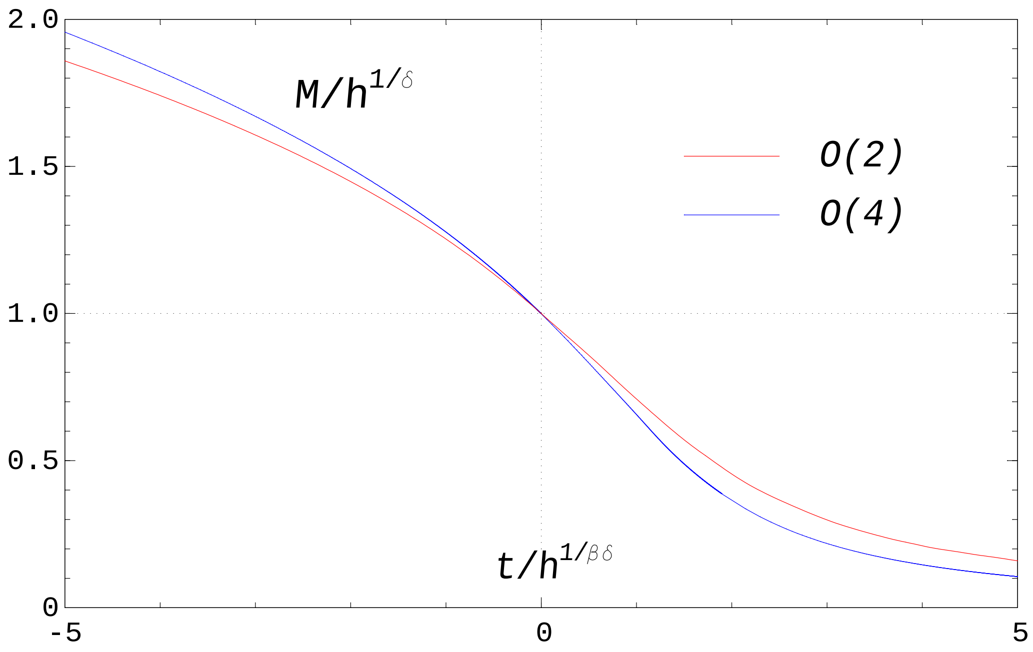


Abbildung 5.4: Skalenfunktionen f_G des O(2)-und O(4)-Modells im Vergleich: Beide Skalenfunktionen unterscheiden sich sowohl in der kalten als auch der heißen Phase erkennbar durch den flacheren Verlauf der O(2)-Kurve.

Das Ergebnis in Abbildung (5.4) zeigt einen ähnliche Form der Kurven und erwartungsgemäß einen deutlichen Unterschied zwischen O(2) und O(4) sowohl in der kalten als auch in der heißen Phase. Dies liegt natürlich an den verschiedenen Universalitätsklassen. Beide Kurven verlaufen sehr nahe beieinander, so dass es schwierig werden kann, eine zukünftige korrekt normierte Fermionen-Skalenfunktion mit denen der beiden Spinmodell-Funktionen zu vergleichen. Dies wäre für den Fall, dass QCD-Datenpunkte sehr dicht an den Kurven liegen und die gleiche Form haben.

Mit Hilfe einiger Daten aus [25] und [26] konnte man versuchen, QCD-Daten mit Staggered-Wirkung mit der O(2)-Skalenfunktion zu vergleichen. Für QCD-Daten mit konstantem N_τ ist der Ordnungsparameter das chirale Kondensat $<\bar{\Psi}\Psi>$. Das kritische Verhalten wird kontrolliert durch zwei äußere Parameter, der reduzierten Temperatur $\bar{t}$ und dem symmetriebrechenden Feld $\bar{h} \equiv m_q/T$ mit Quarkmasse m_q. Für die gitterregularisierte QCD in der Staggered-Formulierung sind diese Parameter durch die beiden dimensionslosen Kopplungen

$$\bar{t} = \frac{6}{g^2} - \frac{6}{g_c^2(0)} \tag{5.7}$$

$$\bar{h} = m_q N_\tau \tag{5.8}$$

gegeben*. Dabei bezeichnet $g_c^2(0)$ die kritische Kopplung eines Gitters mit zeitlicher Ausdehnung N_τ für den Grenzfall $m_q \to 0$. Im Falle einer konstanten Quarkmasse $m_q > 0$ wird eine pseudokritische Kopplung $g_c^2(m_q)$ definiert, die in dem betrachteten Fall die abgeschätzte Peakposition der Suszeptibilität für den Fall $N_\sigma \to \infty$ angibt. Dies geschieht bei einer konstanten Skalenvariablen

$$z_{pc} \equiv \bar{t}\bar{h}^{-1/\beta\delta}, \tag{5.9}$$

welche äquivalent ist zu der Gleichung

$$\frac{6}{g_c^2}(m_q) = \frac{6}{g_c^2}(0) + z_{pc}(m_q N_\tau)^{\frac{1}{\beta\delta}} \tag{5.10}$$

mit den kritischen Exponenten β und δ.
Eine Bestimmung der Peakposition $\beta_c(m_q) \equiv \frac{6}{g_c^2}(m_q)$ in der Suszeptibilität im Grenzfall $N_\sigma \to \infty$ wurde z.B. von Karsch et al. [26] und Aoki et al. [24] bei $N_\tau = 4$ durchgeführt.
Man kann so z.B. drei verschiedene Fälle betrachten, indem diese QCD-Daten, eingesetzt in Gleichung (5.10), entweder mit den kritischen Exponenten des O(2)/O(4)-Modells oder mit den Mean-Field-Exponenten gefittet werden, um die Kopplung $\beta_c(0)$ zu erhalten. Abbildung (5.5)† zeigt den Ansatz (5.10) mit verschiedenen Sätzen von kritischen Exponenten. Dabei wurden zum Fitten nur Quarkmassen verwendet, bei denen Gitter mit $N_\sigma > 8$ verwendet wurden. Tabelle (5.1) zeigt, dass sowohl die Meanfield-Exponenten (MF) als auch die jeweiligen O(N)-Exponenten einen ordentlichen Fit erlaubten. Die gefitteten Kurven hatten dabei sehr ähnliche Formen, und die Ergebnisse für $\beta_c(0)$ lagen sehr dicht beieinander. Erwartungsmäßig lag der Wert für O(2) zwischen Meanfield und O(4). Damit war es möglich, die reduzierten Temperaturen $\bar{t}$ von QCD-Daten für den Vergleich mit dem O(2)-Modell anzugeben. Nun sollte die Skalenfunktion f_G des O(2)-Modells mit einer möglichen Skalenfunktion der QCD-Daten verglichen werden. Üblicherweise setzt man die Parameter der

*Dabei wurde die Gitterkonstante $a = 1$ gesetzt.

†Die in Abbildung (5.5) verwendeten Datenpunkte wurden von Priv. Doz. Dr. E. Laermann et al. freundlicherweise zur Verfügung gestellt.

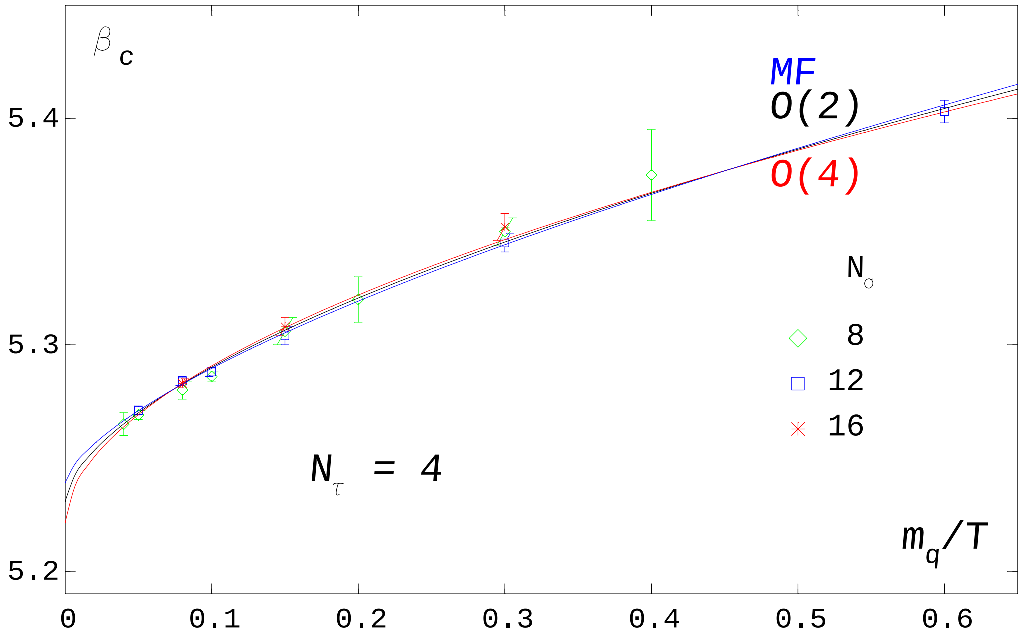


Abbildung 5.5: Bestimmung der kritischen Kopplung für verschwindende Quarkmassen bei $N_\tau = 4$ mit kritischen O(2)-, O(4)- und Meanfield-Exponenten.

Modell	β	δ	Ref.	$\beta_c(0)$	χ^2/dof
0(2)	0.3490	4.7798	[16]	5.2309(24)	0.72
O(4)	0.3836	4.851	[27]	5.2215(28)	0.89
MF	0.5	3.0	[9]	5.2391(21)	0.90

Tabelle 5.1: Ergebnis für $\beta_c(0)$ bei verschiedenen Sätzen von kritischen Exponenten.

QCD folgendermaßen mit denen der O(N)-Modelle in Verbindung:

$$< \bar{\Psi}\Psi > \quad \hat{=} \quad M \tag{5.11}$$
$$m_q/T \;=\; m_q N_\tau \quad \hat{=} \quad h \tag{5.12}$$
$$6/g^2 - 6/g_c^2 \quad \hat{=} \quad T/T_c - 1 \;=\; \bar{t}. \tag{5.13}$$

Da die Normierungskonstanten H_0^{QCD} und T_0^{QCD} der QCD nicht bekannt waren, ließ sich die Skalenfunktion nur in Abhängigkeit zweier fehlender Parameter als

$$\begin{aligned} < \bar{\Psi}\Psi > h^{-1/\delta} &= f_{QCD}(th^{-1/\beta\delta}) \\ \Leftrightarrow \; < \bar{\Psi}\Psi > H^{-1/\delta} &= c_y \cdot f_G(c_x \cdot \bar{t} H^{-1/\beta\delta}) \end{aligned} \tag{5.14}$$

formulieren. Die verwendenten kritischen Exponenten waren die des O(2)-Modells. c_x und c_y mußten nun so lange justiert werden, bis QCD-Daten und O(2)-Kurve eventuell zusammenpassten. Zur einfacheren Darstellung der Daten, wurden diese in doppellogarithmischer Form geplottet.

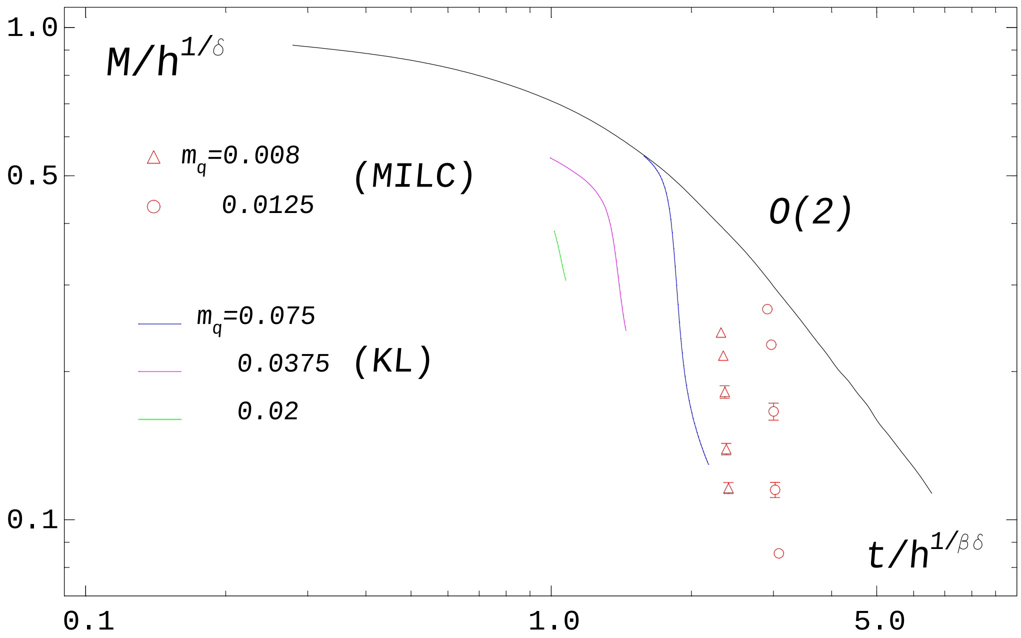


Abbildung 5.6: Logarithmischer Vergleich der O(2)-Skalenfunktion mit verschiedenen staggered QCD-Daten für $N_\tau = 4$.

Abbildung (5.6) zeigt, dass die QCD-Daten gar nicht zu der O(2)-Funktion passen, unabhängig von c_x und c_y, da die Daten per se schon nicht skalieren. Die farbigen Linien zeigen Daten von Karsch et al. (KL), die auf $8^3 \times 4$-Gittern bei den Quarkmassen $m_q = 0.075, 0.0375, 0.02$ simuliert wurden. Offensichtlich skalieren diese Daten nicht und können auch nicht die Form der Skalenfunktion produzieren. Hier lag das Problem aber wahrscheinlich an dem zu kleinen Gitter. Die Datenpunkte der MILC-Gruppe (rote Punkte, $m_q = 0.0125, 0.008$) lagen zwar durch die Wahl von c_x und c_y näher an O(2), doch auch hier skalierten die Daten trotz Simulationen auf einem $24^3 \times 4$-Gittern bei kleineren Massen nicht. Außerdem schien die QCD-Kurve für wachsende Quarkmassen steiler zu werden. Somit spielten Finite Size-Effekte für die Simulationen noch eine entscheidende Rolle, und man konnte spekulieren, dass Simulationen mit den verwendeten Quarkmassen noch nicht die kritische Region erreichten. Für einen besseren Vergleich wären also Simulationen mit größerem N_τ bei kleinen Quarkmassen nötig.

In [25] wurden QCD-Daten für $N_\tau \geq 4$ mit der O(4)-Skalenfunktion verglichen. Da die O(2)- und die O(4)-Skalenfunktion ungefähr dieselbe Form haben, ist das Ergebnis auch für O(2) interessant.
Die Abbildungen (5.7) zeigen für $N_\tau = 4$ den gleichen Unterschied zwischen den Daten und der O(4)-Funktion. Mit wachsendem N_τ schienen die Datenpunkte aber eine flachere Form zu beschreiben. Dieses Verhalten gab zwar Grund zur Hoffnung, aber man durfte diese Daten für $N_\tau > 4$ nicht überbewerten. Es waren nämlich keine Messungen mit $N_\sigma > 2N_\tau$ vorhanden, und die Daten bei $N_\tau = 12$ waren nur für eine einzige Quarkmasse durchgeführt worden, so dass man nicht sagen konnte, ob Datenpunkte unterschiedlicher Masse skalierten.

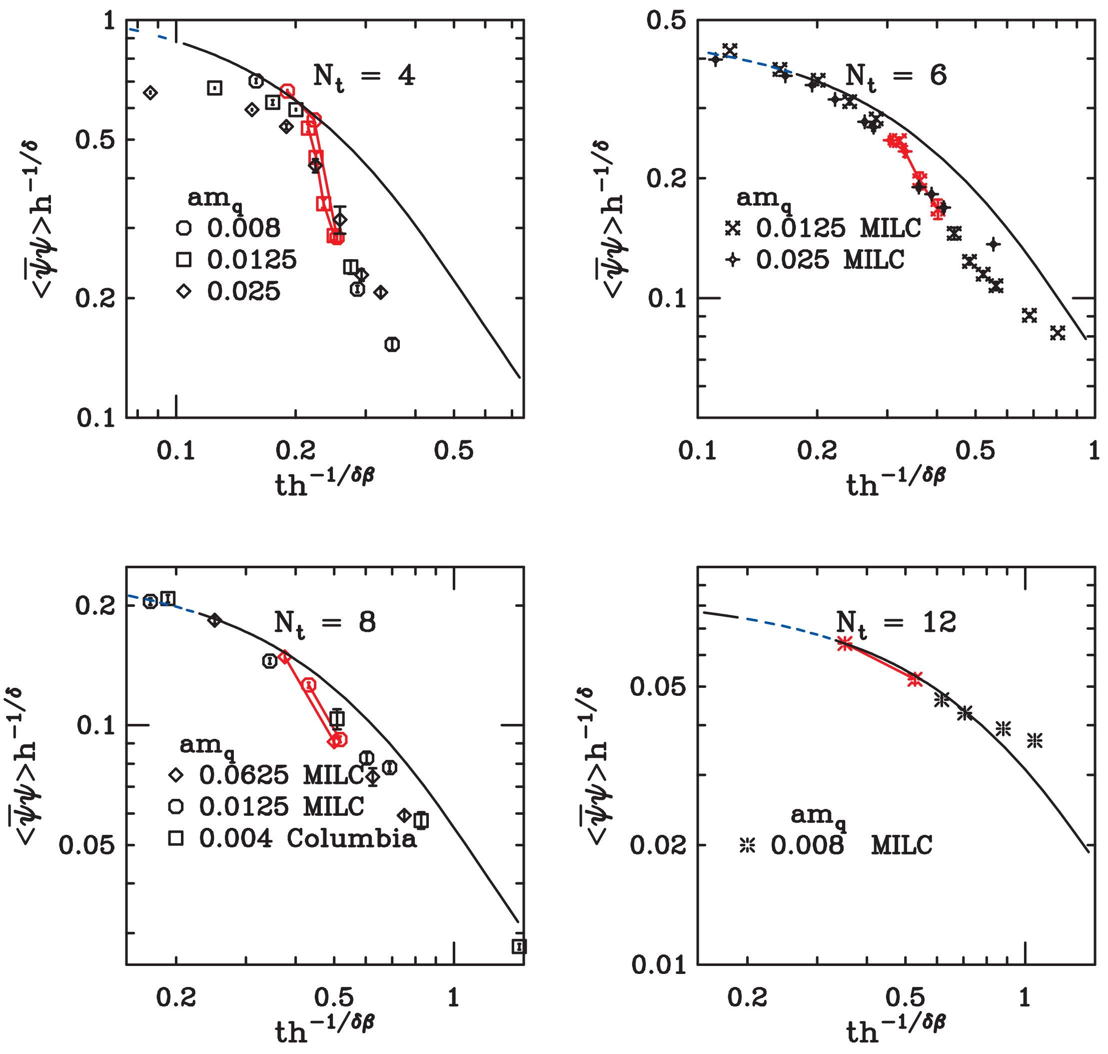


Abbildung 5.7: Vergleich der O(4)-Skalenfunktion mit staggered QCD-Daten bei verschiedenen N_τ.

Zusammenfassung

In dieser Arbeit wurde das dreidimensionale O(2)-Modell auf einem kubischen Gitter mit periodischen Randbedingungen in Abhängigkeit von einem äußeren Feld H und der Temperatur T simuliert. Dabei wurde das Verhalten des Modells am kritischen Punkt, in der kalten und in der heißen Phase studiert, und die daraus gewonnenen Ergebnisse zur Berechnung der Skalenfunktion f_G verwendet.

Am kritischen Punkt $T = T_c$ konnte mit geringen Korrekturen das erwartete Skalenverhalten nachgewiesen werden. Mit Hilfe eines Ansatzes zur Berücksichtigung dieser Korrekturen war es darüberhinaus möglich, die kritische Amplitude d_c des führenden Terms der Magnetisierung zu berechnen, um daraus die Feldnormierung H_0 zu erhalten.
In der kalten Phase $T < T_c$, nahe an der Koexistenzlinie ($H \to 0$), ergaben sich starke Finite Size-Effekte. Zusätzlich konnte das durch den Goldstone-Effekt auftretende $\sqrt{H}$-Verhalten beobachtet werden, mit dessen Hilfe es möglich war, für verschiedene Temperaturen auf die spontane Magnetisierung $M(T, H \to 0)$ zu extrapolieren. Aufgrund der Finite Size-Effekte in der Nähe von $H = 0$ wurde diese spontane Magnetisierung bei $H = 0$ auch mit Hilfe der chiralen Störungstheorie verifiziert. Diese gestattete es, bei kleinem konstantem Feld die durch Goldstone-Moden induzierte Volumenabhängigkeit zu nutzen, um ebenfalls $M(T, H \to 0)$ zu berechnen. Der Weg funktionierte erstaunlich gut und lieferte eine sehr genaue Übereinstimmung mit den extrapolierten Daten. Das Ergebnis konnte darüberhinaus durch einige Simulationen direkt bei $H = 0$ zusätzlich bestätigt werden. Auf der Koexistenzlinie ergaben sich sehr starke Korrekturen zur dortigen Skalenrelation, so dass abermals erst ein modifizierter Ansatz für die gefundenen Magnetisierungen die kritische Amplitude B lieferte, die zur Temperaturnormierung T_0 führte.
In der heißen Phase $T > T_c$ nahmen dagegen die Finite Size-Effekte erwartungsgemäß ab. Ferner konnte bestätigt werden, das sich bei konstanter Temperatur und kleinem Feld die Magnetisierung proportional zum angelegten Feld verhielt. Dieser Effekt war mit zunehmender Temperatur besser zu erkennen.

Die gewonnenen Daten ergaben bei der Überprüfung ihres Skalenverhaltens keine einzelne Kurve, so dass die Skalenfunktion f_G des O(2)-Modells nicht direkt beobachtet werden konnte. Man stellte nämlich fest, dass in der kalten Phase starke Corrections to Scaling auftraten, so dass die Magnetisierungskurven für verschiedene Temperaturen nicht skalierten. In der heißen Phase war dieser Effekt im Wesentlichen nicht vorhanden, so dass Messpunkte nahe am kritischen Punkt direkt skalierten.
Durch eine Verallgemeinerung der Skalenfunktion f_G, um Korrekturen durch die erste irrelevante Skalenvariable zu berücksichtigen, konnten die Daten der kalten Phase denoch genutzt werden, um auch dort die universelle Form zu berechnen.

In dieser Form von f_G ließ sich die O(2)-Skalenfunktion mit der des O(4)-Modells vergleichen. Dabei stellte sich sichtbar heraus, dass die O(2)-Kurve sowohl in der kalten Phase als auch in der heißen Phase überall flacher ist als die entsprechende O(4)-Kurve. Der Vergleich mit unnormierten und volumenabhängigen Staggered-Fermionen-Daten zeigte deutliche Unterschiede sowohl zwischen QCD-Daten und O(2) als auch zwischen QCD und O(4), da vorliegende QCD-Daten überhaupt kein Skalenverhalten mit den kritischen Exponenten der beiden Spinmodelle zeigten. Gründe dafür könnten sein, dass die verwendeten Quarkmasse zu groß und die verwendeten Gitter zu klein sind. Um den Finite Size-Effekt besser zu verstehen, wäre dann ein Vergleich von QCD-Daten mit Finite Size-Skalenfunktionen der Spinmodelle eine mögliche Alternative. Darüberhinaus sollten Gittersimulationen mit Staggered-Fermionen auf größeren Gittern durchgeführt werden, um näher am thermodynamischen Limes zu sein. Verwendet man dabei verbesserte Wirkungen, könnten Simulationen bei $N_\tau = 6$ bessere Daten mit weniger Korrekturen liefern.

Literaturverzeichnis

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

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

[3] K. Huang, *Statistical Mechanics (2. Edition)*, John Wiley & Sons Inc. (1987).

[4] H. J. Rothe, *Lattice Gauge Theories - An Introduction*, World Scientific, Singapore, New Jersey, London, Hong Kong (1992).

[5] M. E. Peskin, D. V. Schroeder, *An Introduction to Quantum Field Theory*, Addison-Wesley Publishing Company (1995).

[6] 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).

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

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

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

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

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

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

[13] M. Campostrini, A. Pelisetto, P. Rossi, E. Vicari, *High-precision determination of the critical exponents for the λ -transition of ^4He by improved high-temperature expansion*, Nucl, Phys. B(Proc. Suppl.) **53** (1997) 690.

[14] M. Campostrini, A. Pelisetto, P. Rossi, E. Vicari, *The critical equation of state of three-dimensional XY systems*, cond-mat/0001440 (2000).

[15] H.G. Ballesteros, L.A. Fernández, V. Martín-Mayor, A. Muñoz Sudupe, *Finite size effects on measures of critical exponents in d=3 O(N) models*, Phys. Lett. B**387** (1996) 125.

[16] M. Hasenbusch, T. Török, *High precision Monte Carlo study of the 3D XY-universality class*, Humboldt University preprint HUB-EP-99/18, cond-mat/9904408 (1999).

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

[18] 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).

[19] P. Hasenfratz, H. Leutwyler, *Goldstone Boson related finite size effects in Field Theory and Critical Phenomena with O(N) Symmetry*, Nucl. Phys. B343 (1990) 241.

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

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

[22] S. Tominaga and H. Yoneyama, *Chiral perturbation theory, finite size effects and the three-dimensional XY model*, Phys. Rev. B**51** (1995) 8243.

[23] A. Ali Khan et al. (CP-PACS Collaboration), *Equation of state in finite-temperature QCD with improved Wilson quarks*, Nucl. Phys. (Proc.Suppl.) **83** (2000) 360.

[24] S. Aoki et al. (JLQCD Collaboration), *Scaling Study of the Two-Flavor Chiral Phase Transition with the Kogut-Susskind Quark Action in Lattice QCD*, Phys.Rev. D**57** (1998) 3910.

[25] C. Bernard et al. (MILC Collaboration), *Critical Behaviour in $N_t = 4$ Staggered Fermion Thermodynamics*, Phys. Rev. D**61** (2000) 054503.

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

[27] K. Kanaya, S. Kaya, *Critical exponents of a three dimensional O(4) spin model*, Phys. Rev. D**51** 2404 (1995).

Danksagung

Diese Arbeit wurde unter Anleitung von Prof. Dr. Jürgen Engels durchgeführt. Ich danke Herrn Prof. Dr. Engels für die hervorragende Betreuung meiner Diplomarbeit und seine Bereitschaft, sich jederzeit mit meinen Fragen ausführlich auseinanderzusetzen und Probleme zu diskutieren.

Insbesondere möchte ich mich bei Dr. Tereza Mendes bedanken, die ebenfalls immer zur Verfügung stand, um Unklarheiten zu diskutieren und zu beseitigen. Ein Dank an meinen Freund und Kommilitonen Thomas Schulze ist selbstredend.
Darüber hinaus möchte ich die gesamte Arbeitsgruppe loben, die immer zu einer angenehmen Atmosphäre beigetragen hat.

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