Kritisches Verhalten in O(4)-symmetrischen Spinmodellen und 2-flavour QCD

Diplomarbeit
Fakultät für Physik
Universität Bielefeld

vorgelegt von
Manfred Oevers

5. Februar 1996

Inhaltsverzeichnis

Abbildungsverzeichnis

Einleitung

Phasenübergänge bestimmen unser tägliches Leben. Durch die fortwährenden Phasenübergänge von H_2O ist Leben auf dieser Erde erst möglich. Viele Phasenübergänge sind von großem technologischen Interesse wie zum Beispiel der Übergang vom Leiter zum Supraleiter. Ein Phasenübergang außerhalb unserer alltäglichen Erfahrungswelt ist der Übergang von hadronischer Materie zu einem Quark-Gluon-Plasma bei endlicher Temperatur und/oder endlicher Baryonendichte.

Die **Q**uanten **C**hromo **D**ynamik ist die fundamentale Theorie der starken Wechselwirkung. Insbesondere ihr Erfolg bei der Beschreibung von Experimenten zur tiefinelastischen Streuung, also im störungstheoretischen Bereich, wenn große Impulsüberträge vorliegen, haben zu ihrer allgemeinen Akzeptanz als Theorie der starken Wechselwirkung geführt. Daher erwartet man, daß die QCD auch die nichtstörungstheoretischen Aspekte der Hadronphysik erklären kann. Noch ist jedoch nicht streng bewiesen, daß die QCD beispielsweise Confinement, also die Tatsache daß Quarks nicht als freie Teilchen auftreten, vorhersagt. Die Existenz eines Phasenübergangs zu einem Quark-Gluon-Plasma ist eine weitere nicht streng bewiesene Vorhersage, die jedoch sehr plausibel ist. Glaubt man beispielsweise dem Big Bang Szenarium für das frühe Universum, so hat dieser Phasenübergang sicherlich einmal stattgefunden, nachdem sich das Universum nach etwa 10^{-6}sec auf 150 ± 50MeV abgekühlt hatte. Mittlerweile gibt es auch experimentelle Versuche diesen Phasenübergang im Labor durch hochenergetische Schwerionenstöße zu reproduzieren. Es ist daher wichtig, diesen Phasenübergang quantitativ und qualitativ genau zu verstehen. Dabei ist die Bestimmung der Übergangstemperatur, die Ordnung des Phasenübergangs und die Temperaturabhängigkeit thermodynamischer Größen in der Umgebung des Phasenübergangs von besonderem Interesse.

Phasenübergänge sind häufig mit der spontanen Brechung einer Symmetrie der Lagrangedichte verbunden. Im Fall der QCD gibt es zwei solche Symmetrien, die jedoch erst in gewissen Limiten der Theorie manifest werden.
Betrachtet man die sogenannte Valenzquark-Approximation, in der die Massen der Quarks unendlich groß sind, so ist die relevante Symmetrie eine globale Z(3) Symmetrie, die aus der lokalen SU(3)-Symmetrie der Theorie resultiert. Der Ordnungs-

parameter dieser Symmetrie ist der sogenannte Polyakov-Loop. Der Logarithmus seines Erwartungswertes ist proportional zur negativen freien Energie eines freien Quarks. In der symmetrischen Phase ist dieser Erwartungswert Null. Quarks können nicht frei existieren. In der gebrochenen Phase ist der Erwartungswert ungleich Null, die Quarks können als freie Teilchen existieren. Diese Symmetrie ist daher mit dem Deconfinement-Übergang verknüpft.
Ist die Masse der Quarks Null, so besitzt die Lagrangedichte für f Quarkflavours eine chirale $SU(f)_V \times SU(f)_A \times U(1)_V$-Symmetrie. Klassisch existiert noch eine $U(1)_A$-Symmetrie, die jedoch durch Quanteneffekte explizit gebrochen ist. In der vorherrschenden hadronischen Welt ist die chirale Symmetrie spontan gebrochen und die Pionen treten als Goldstone-Teilchen auf. Oberhalb des Phasenübergangs wird die chirale Symmetrie restauriert und der Erwartungswert des chiralen Kondensats verschwindet.

Auch wenn in der Natur keiner der beiden Grenzfälle realisiert ist und man daher statt eines Phasenübergangs nur ein Crossover beobachten wird, so stellt sich doch die Frage in welchem dynamischen Zusammenhang die beiden Effekte stehen. Gittersimulationen der QCD zeigen nämlich das Auftreten beider Übergänge bei derselben kritischen Kopplung.

Der Deconfinement-übergang ist gründlich untersucht, zum einen direkt in der Gitterregularisierung der Theorie sowie indirekt mit Hilfe effektiver Modelle. Letztere Möglichkeit basiert auf der Beobachtung, daß das Verhalten der Theorie am Phasenübergang durch das langreichweitige Verhalten des Ordnungsparameters bestimmt wird. Dieses wird durch ein dreidimensionales Z(3)-symmetrisches Spinmodell mit ferromagnetischer Nächster-Nachbar-Wechselwirkung, einem drei-Zustands-Potts-Modell, beschrieben. Im starken Kopplungslimes kann man dieses Modell explizit durch Ausintegration der räumlichen Freiheitsgrade als effektive dreidimensionale Theorie des Polyakovloops erhalten. Dies ist ein Beispiel für Universalität. Das kritische Verhalten eines Systems wird wesentlich von den Symmetrien des Ordnungsparameters bestimmt und ein anderes System mit derselben Symmetrie zeigt dasselbe kritische Verhalten.

Für den Fall des chiralen Phasenübergangs ist es bisher nicht gelungen aus der vollen QCD-Wirkung in 3+1 Dimensionen als effektive QCD-Wirkung die Wirkung eines einfacheren Modells in 3 Dimensionen abzuleiten. Mit Hilfe von Universalitätsargumenten kommt man jedoch zu dem Schluß, daß der chirale Phasenübergang in vier Dimensionen für f masselose Quarkflavours in derselben Universalitätsklasse liegt wie O($2f$)-symmetrische Spinmodelle in drei Dimensionen. Daher ist es interessant, solche Modelle zu untersuchen und mit Simulationen der vollen Theorie zu vergleichen, um obige Hypothese zu bestätigen oder zu widerlegen.

Besonders interessant ist der Fall $f = 2$. In der Natur sind die Quarks nämlich nicht masselos. Zwei Quarks (up und down) sind sehr leicht (auf der Skala der starken

Wechselwirkung) und ein drittes (strange) ist noch nicht allzu schwer. Die anderen Quarkflavours spielen für die Thermodynamik keine Rolle, da Beiträge schwerer Quarks exponentiell mit der Masse unterdrückt sind. Für $f = 2$ erhält man das sogenannte O(4)-symmetrische Heisenbergmodell, es hat einen Phasenübergang zweiter Ordnung. Falls also der chirale Phasenübergang zweiter Ordnung ist, und die Universalitätsargumente analog zu skalaren Theorien anwendbar bleiben, so ist er in derselben Universalitätsklasse wie dieses Modell. Das kritische Verhalten eines Systems wird dabei durch sogenannte kritische Exponenten ($\alpha, \beta, \gamma, \nu, \delta$ und η) erfaßt, die das Divergenzverhalten verschiedener thermodynamischer Observablen in der Umgebung der kritischen Temperatur beschreiben. In dieser Arbeit wurden die kritischen Exponenten β, γ, ν und die kritische Temeratur bestimmt. Die restlichen Exponenten ergeben sich dann aus sogenannten Skalenrelationen, die zwischen den Exponenten bestehen. Außerdem wurden Daten analysiert, die von einer Simulation der vollen Theorie in der staggered Diskretisierung für Fermionen stammen.

Im ersten Kapitel wird die QCD als Eichtheorie formuliert und ihre Symmetrien diskutiert. Daran schließt sich ein Abschnitt an, in dem die Argumente erläutert werden, die zu der These führen, daß QCD mit zwei masselosen Quarks in derselben Universalitätsklasse liegt wie das dreidimensionale O(4)-symmetrische Heisenbergmodell, falls der Phasenübergang zweiter Ordnung ist.

Im zweiten Kapitel werden die verwendeten numerischen Methoden vorgestellt. Dabei wird der zur Simulation verwendete Clusteralgorithmus nach Wolff und die Ferrenberg-Swendsen-Methode zur Auswertung der so erhaltenen Daten erläutert.

Im dritten Kapitel werden die numerischen Resultate aufgefürt und mit Ergebnissen der 2-flavour QCD verglichen.

Im Anhang werden die numerischen Ergebnisse in tabellarischer Form wiedergegeben.

Kapitel 1

QCD und der O(4)-Magnet

1.1 QCD und ihre Symmetrien

Die Starke Wechselwirkung wird im Standardmodell durch eine lokale Eichtheorie beschrieben. Diese wird in Analogie zur Quantenelektrodynamik wie folgt konstruiert:
Zunächst ersetzt man in der Lagrangedichte für freie Teilchen die partielle Ableitung durch die kovariante Ableitung:

$$\bar{\Psi}(x)(i\partial\!\!\!/ - m_f)\Psi(x) \quad \longrightarrow \quad \bar{\Psi}(x)(iD\!\!\!\!/ - m_f)\Psi(x). \tag{1.1}$$

Dadurch wird die Lagrangedichte invariant unter lokalen Eichtransformationen der Form:

$$\begin{aligned} \Psi(x) &\longrightarrow G(x)\Psi(x) \\ \text{und}\quad \bar{\Psi}(x) &\longrightarrow \bar{\Psi}(x)G^\dagger(x) & (1.2) \\ A^\mu(x) &\longrightarrow G(x)A^\mu(x)G^\dagger(x) - \frac{i}{g}G(x)\partial^\mu G^\dagger(x). & (1.3) \end{aligned}$$

Nun addiert man noch einen Term, der auch die Eichfelder A_μ zu dynamischenFeldern macht. Dazu definiert man den Feldstärketensor wie folgt:

$$F_{\mu\nu} = \frac{1}{ig}\left[D\!\!\!\!/_\mu, D\!\!\!\!/_\nu\right]. \tag{1.4}$$

Im Falle der U(1)-symmetrischen QED erhalten wir den bekannten eichinvarianten Ausdruck

$$F_{\mu\nu} = \partial_\mu A_\nu - \partial_\nu A_\mu. \tag{1.5}$$

In einer nichtabelschen Eichtheorie wie der QCD bekommt man noch einen zusätzlichen Term, der die Selbstwechselwirkung der Gluonen untereinander beschreibt. Der Feldstärketensor ist auch nicht eichinvariant sondern transformiert sich wie folgt:

$$F_{\mu\nu} \longrightarrow G(x) F_{\mu\nu} G^{\dagger}(x). \tag{1.6}$$

Der Ausdruck $\mathrm{Sp}\,(F_{\mu\nu}(x)F^{\mu\nu}(x))$ ist jedoch wie gewünscht eichinvariant. Beachtet man nun noch die veschiedenen Flavour (up, down, strange, ...) so lautet die Lagrangedichte der QCD:

$$\mathcal{L}_{QCD}(x) = \sum_f \bar{\Psi}(x)(i\not{D} - m_f)\Psi(x) - \frac{1}{2}\mathrm{Sp}\,(F_{\mu\nu}(x)F^{\mu\nu}(x)) \tag{1.7}$$

dabei sind: (1.8)

$$\begin{aligned}
\not{D} &= \gamma^{\mu} D_{\mu} \\
D_{\mu} &= \partial_{\mu} + \frac{i}{2} g A_{\mu} \\
F_{\mu\nu} &= F^{j}_{\mu\nu}\frac{\lambda_j}{2} = \partial_{\mu}A_{\nu} - \partial_{\nu}A_{\mu} + i\,g\,[A_{\mu}, A_{\nu}] \\
F^{j}_{\mu\nu} &= \partial_{\mu}A^{j}_{\nu} - \partial_{\nu}A^{j}_{\mu} - g\,f_{jkl}A^{k}_{\mu}A^{l}_{\nu} \\
A_{\mu} &= A^{l}_{\mu}\frac{\lambda_l}{2}.
\end{aligned}$$

Die γ_{μ} sind die Gamma-Matrizen, die den Antivertauschungsregeln $\{\gamma_{\mu}, \gamma_{\nu}\} = 2g_{\mu\nu}$ genügen ($g_{\mu\nu}$ ist der metrische Tensor). Die λ_l sind die Gell-Mann-Matrizen und erzeugen die Gruppe SU(3). Sie genügen den Vertauschungsregeln $\left[\frac{\lambda_i}{2}, \frac{\lambda_j}{2}\right] = i\,f_{ijk}\left(\frac{\lambda_k}{2}\right)$. Eine weitere wichtige Symmetrie der QCD ist die chirale Symmetrie. Dazu definiert man zunächst die Projektionsoperatoren

$$\Gamma_L = \frac{1}{2}(1+\gamma_5) \quad \text{und} \quad \Gamma_R = \frac{1}{2}(1-\gamma_5) \tag{1.9}$$

$$\text{mit} \quad \gamma_5 = i\gamma^0\gamma^1\gamma^2\gamma^3, \tag{1.10}$$

und mit ihrer Hilfe definiert man nun

$$\Psi_L(x) = \Gamma_L\Psi(x) \quad \text{und} \quad \Psi_R(x) = \Gamma_R\Psi(x); \tag{1.11}$$

drückt man jetzt die Lagrangedichte in den Feldern Ψ_L und Ψ_R aus, so erhält man folgendes:

$$\mathcal{L}_{QCD}(x) = i\bar{\Psi}_L(x)\not{D}\Psi_L(x) + i\bar{\Psi}_R(x)\not{D}\Psi_R(x) - m\Big(\bar{\Psi}_L(x)\Psi_R(x) + \bar{\Psi}_R(x)\Psi_L(x)\Big) + \ldots \tag{1.12}$$

Da nur der Massenterm linkshändige und rechtshändige Felder koppelt, ist die Lagrangedichte bei verschwindenden Quarkmassen invariant unter den Transformationen:

$$\begin{aligned}
\Psi_L(x) &\longrightarrow \exp(-i\theta_L)\exp(-i\boldsymbol{\theta}_L\boldsymbol{\tau})\Psi_L(x) \\
\Psi_R(x) &\longrightarrow \exp(-i\theta_R)\exp(-i\boldsymbol{\theta}_R\boldsymbol{\tau})\Psi_R(x).
\end{aligned} \tag{1.13}$$

Die $\boldsymbol{\tau}$ sind dabei die Erzeugenden der Gruppe SU(N) und $\boldsymbol{\theta}_{L/R}$ sind Vektoren von beliebigen Winkeln. Und $\theta_{L/R}$ sind weitere Winkel, die U(1)-Transformationen generieren. Tatsächlich sind die Massen der Quarks nicht Null. Auf der Skala der starken Wechselwirkung sind jedoch die Massen von up- und down-Quark vernachlässigbar, so daß wir N=2 setzen können. Überhaupt wollen wir von nun an nur den Fall der 2-Flavour-QCD betrachten. Der Massenterm bricht also die chirale Symmetrie, aber er bricht sie nicht ganz, denn wenn man linkshändige Felder und rechtshändige Felder um die gleichen Winkel $\boldsymbol{\theta}$ und θ dreht, bleibt auch der Massenterm invariant. Man kann die chiralen Transformationen auch so aufschreiben, daß man dies explizit sieht:

$$\begin{aligned} \Psi(x) &\longrightarrow \exp(-i\theta_V)\exp(-i\boldsymbol{\theta}_V\boldsymbol{\tau})\Psi(x) \\ \Psi(x) &\longrightarrow \exp(-i\theta_A\gamma_5)\exp(-i\boldsymbol{\theta}_A\boldsymbol{\tau}\gamma_5)\Psi(x), \end{aligned} \quad (1.14)\ (1.15)$$

mit:

$$\begin{aligned} \boldsymbol{\theta}_V &= \frac{\boldsymbol{\theta}_R + \boldsymbol{\theta}_L}{2} \quad \text{und} \quad \boldsymbol{\theta}_A = \frac{\boldsymbol{\theta}_R - \boldsymbol{\theta}_L}{2} \\ \theta_V &= \frac{\theta_R + \theta_L}{2} \quad \text{und} \quad \theta_A = \frac{\theta_R - \theta_L}{2} \end{aligned} \quad (1.16)$$

In diese Darstellung nennt man die chirale Symmetrie auch $SU(2)_V \times SU(2)_A \times U(1)_V \times U(1)_A-$Symmetrie. Dabei steht V für vektoriell und A für axial. Die axiale U(1) ist zwar eine Symmetrie auf klassischem Niveau, wird aber durch Quanteneffekte gebrochen, man bezeichnet dies als axiale Anomalie. Es stellt sich nun die Frage in welcher Weise diese Symmetrie in der Natur realisiert ist. Wäre die chirale Symmetrie im sogenannten Wignermodus realisiert, hätte jeder Zustand der Theorie einen Partner gleicher Masse mit entgegengesetzter Parität. Die Massen der als Paritätspaare in Frage kommenden Teilchen sind jedoch so unterschiedlich, daß man nicht davon ausgehen kann, die chirale Symmetrie im Wignermodus vorliegen zu haben. Also ist die chirale Symmetrie spontan gebrochen, was nach dem Goldstone-Theorem die Existenz masseloser Teilchen mit den Quantenzahlen des Pions impliziert. Tatsächlich sind die Pionen extrem leicht. Daß sie nicht masselos sind hängt damit zusammen, daß die leichten Quarks (up, down) nicht wirklich masselos sind. Man kann nämlich zeigen, daß die Goldstonebosonen bei einer spontanen Symmetriebrechung in Anwesenheit einer kleinen expliziten Symmetriebrechung massiv werden

$$M_\pi^2 = (m_u + m_d)B(1 + O(m_u + m_d)). \quad (1.17)$$

Nach der Entdeckung, daß die QCD eine asymptotisch freie Theorie ist [1], wurde auch klar, daß sich die QCD bei hohen Temperaturen gänzlich anders verhält als in der uns bekannten hadronischen Welt. Bei großer Temperatur oder großer Baryonendichte beschreibt die QCD eine Welt schwach wechselwirkender Quarks und Gluonen. Diese Situation eröffnet die Möglichkeit eines Phasenübergangs. Bei diesem

Phasenübergang würde aus der normalen hadronischen Materie ein Quark-Gluon-Plasma entstehen. Die in Hadronen gebundenen Quarks und Gluonen würden dabei befreit. Diesen Übergang nennt man *Confinement-Deconfinement-Übergang*. Weiterhin würde die chirale Symmetrie restauriert. Bei niedrigen Temperaturen bildet sich ein sogenanntes Kondensat, welches die chirale Symmetrie bricht, das heißt, daß der Vakuumerwartungswert des Operators $\bar{\Psi}\Psi$ nicht verschwindet: $\langle 0|\bar{\Psi}\Psi|0\rangle \neq 0$. Im Quark-Gluon-Plasma ist die Wechselwirkung so schwach, daß sich kein solches Kondensat bilden kann und die chirale Symmetrie wird restauriert. Diesen Phasenübergang nennt man den *chiralen Phasenübergang*. Es ist nach wie vor ungeklärt in welchem Zusammenhang die beiden Phasenübergänge stehen, insbesondere, ob sie bei der selben Temperatur stattfinden oder nicht. Gitter-Rechnungen deuten jedoch darauf hin, daß beide Phasenübergänge bei derselben Temperatur stattfinden.

1.2 Die Renormierungsgruppe und kritische Phänomene

1.2.1 Ortsraumrenormierung

Die Techniken der Ortsraumrenormierung können auf Modelle angewendet werden, die als Gittermodelle mit diskreter Skalensymmetrie formuliert sind. Sie werden häufig auch unter dem Namen Blockspintransformationen diskutiert. Damit ist gemeint, daß in geeigneter Weise Gruppen von Gitterpunkten zusammengefaßt werden und durch einen einzelnen Gitterpunkt ersetzt werden. Man kommt dann bei einem Gitter an, welches genau so aussieht wie das mit dem man angefangen hat, mit dem einzigen Unterschied, daß sich der Gitterabstand von a auf $a' \equiv ba$ ändert. Nehmen wir nun an, daß an jedem Gitterpunkt Variablen definiert sind, die wir als Spins bezeichnen wollen. Die Wahrscheinlichkeitsverteilung der Spinkonfigurationen ist durch ihr Boltzmann-Gewicht gegeben:

$$\begin{aligned} P(\{s_i\}) &= \frac{1}{Z}\exp[-\mathcal{H}(\{s_i\})] \\ \text{wobei} \quad Z &= \sum_{\{s_i\}} \exp[-\mathcal{H}(\{s_i\})]. \end{aligned} \tag{1.18}$$

Wenn wir nun unser Gitter blocken, müssen wir jedem Block wieder einen Spin zuweisen. Wir definieren daher Block-Variablen $\sigma_k^{(1)}$, die auf irgendeine Weise von den alten Spins σ_k abhängen. Wenn $\mathcal{S}_k$ die Gitterpunkte im k-ten Block bezeichnet, so heißt das

$$\sigma_k^{(1)} = f(\{\sigma_i\}), \qquad \text{wobei } i \in \mathcal{S}_k. \tag{1.19}$$

Wir sind nun also bei einem Gitter der gleichen Art, aber mit einem Gitterabstand $a' \equiv ba$, angekommen. Die Anzahl der Gitterpunkte hat sich dabei um den Faktor b^d verringert. Die Renormierungstransformation wird vollendet indem man das Gitter in jeder Raumrichtung noch mit dem Faktor b^{-1} skaliert. Damit ist man bei einem Gitter mit derselben Gitterkonstanten a wie vorher angekommen. Ortsraumrenormierung besteht nun in der wiederholten Anwendung dieser Transformation. Nach der n-ten Renormierungstransformation erhalten wir Blockspinvariablen $\sigma_k^{(n)}$ für die gilt:

$$\sigma_k^{(n)} = f(\{\sigma_i^{(n-1)}\}), \qquad \text{wobei } i \in \mathcal{S}_k. \tag{1.20}$$

Da wir die Wahrscheinlichkeitsverteilung für die Spins s_i kennen, können wir die Wahrscheinlichkeitsverteilung der geblockten Spins $\sigma^{(1)}$ berechnen. Wir brauchen nur über die Wahrscheinlichkeiten der Konfigurationen$\{s_i\}$ zu summieren, die mit der Konfiguration $\{\sigma_k^{(1)}\}$ verträglich sind. Auch dies kann man iterieren und gelangt so zu der Wahrscheinlichkeitsverteilung nach n Renormierungsschritten. Wir definieren nun eine effektive Hamiltonfunktion für die Spinkonfiguration $\sigma_i^{(n)}$:

$$\begin{aligned} P^{(n)}(\{\sigma_i^{(n)}\}) &= \frac{1}{Z^{(n)}} \exp[-\mathcal{H}^{(n)}(\{\sigma_i^{(n)}\})] \\ &= \sum_{\substack{\text{Konfigurationen}\{\sigma_i^{n-1}\} \\ \text{konsistent mit}\{\sigma_i^{n}\}}} P^{(n-1)}(\{\sigma_i^{(n-1)}\}) \end{aligned} \tag{1.21}$$

$$\text{wobei} \quad Z^{(n)} \equiv \sum_{\sigma_i^{(n)}} \exp[-\mathcal{H}^{(n)}(\{\sigma_i^{(n)}\})]. \tag{1.22}$$

Diese Definition legt $\mathcal{H}^{(n)}$ bis auf eine Konstante fest. Wir fordern zusätzlich noch, daß $\mathcal{H}^{(n)}$ von derselben funktionalen Form ist wie die ursprüngliche Hamiltonfunktion. Das ist nun im strengen Sinne nicht möglich, da die Hamiltonfunktion ja bereits bis auf eine Konstante festliegt, aber man kann versuchen, die wahre Hamiltonfunktion durch geeignete Wahl der Parameter in der ursprünglichen Hamiltonfunktion möglichst gut zu approximieren. Die Renormierungstransformation induziert also einen Fluß auf dem Parameterraum der ursprünglichen Hamiltonfunktion:

$$\mathbf{H}^{(n+1)} = \mathbf{R}(\mathbf{H}^{(n)}) \tag{1.23}$$

Die Renormierungstransformation wird im allgemeinen Fixpunkte besitzen. Die physikalische Bedeutung von zwei dieser möglichen Fixpunkte ist klar. Es muß einen Hochtemperatur-Fixpunkt sowie einen Tieftemperatur-Fixpunkt geben. Blockt man ein System bei $T = \infty$, so bleibt es ein vollkommen ungeordnetes System mit verschwindender Korrelationslänge und die Parameter ändern sich nicht. Analog verhält es sich mit dem Tieftemperatur-Fixpunkt. Beide Fixpunkte sind attraktiv, d. h. in einer Umgebung des Fixpunktes werden alle Punkte des Parameterraumes auf den Fixpunkt hin renormiert. Zwischen den beiden Fixpunkten muß es eine kritische Fläche geben, die die Einzugsbereiche der beiden Fixpunkte trennt. Punkte auf diese Fläche werden von der Renormierungstransformation wieder in die kritische Fläche abgebildet. In dem für uns interessanten Fall existiert in der kritischen Fläche ein weiterer Fixpunkt, der sogenannte kritische Fixpunkt. Kritisch deshalb, weil an diesem Fixpunkt kritisches Verhalten stattfindet. Die Existenz eines weiteren Fixpunktes, abgesehen von Hoch- und Tieftemperaturfixpunkt, bedeutet, daß unser System bei diesen kritischen Werten der Kopplung skaleninvariant wird. Der Ordnungsparameter fluktuiert auf allen Längenskalen. Die Korrelationsfunktion (genauer: Die zusammenhängende Zwei-Punkt-Korrelationsfunktion) $G_c^{(2)}(r)$ zeigt am kritischen Punkt potenzartiges Verhalten:

$$\begin{aligned} G_c^{(2)}(r) &\propto \frac{e^{-r/\xi}}{r^{d-2+\eta}} \qquad (r \text{ groß und } |T-T_c|/T_c \ll 1) \\ \xi &\propto |T-T_c|^{-\nu} \qquad (|T-T_c|/T_c \ll 1). \end{aligned} \tag{1.24}$$

Dabei ist d die Dimensionalität des Systems, η ein kritischer Exponent und ξ die sogenannte Korrelationslänge des Systems. Man sieht, daß auch in unmittelbarer Nähe von T_c Fluktuationen auf Längenskalen größer als ξ exponentiell unterdrückt sind. Am kritischen Punkt jedoch fluktuiert der Ordnungsparameter auf allen Längenskalen und das System ist skaleninvariant. In der Nähe des kritischen Fixpunktes können wir die Renormierungstransformation entwickeln:

$$\mathbf{R}(\mathbf{H}_0 + \delta\mathbf{H}) = \mathbf{R}(\mathbf{H}_0) + \mathbf{M}\delta\mathbf{H} + O(\delta\mathbf{H}^2) \tag{1.25}$$

$$M_{ij} = \left.\frac{\partial R_i(\mathbf{H})}{\partial H_j}\right|_{\mathbf{H}=\mathbf{H}_0} \tag{1.26}$$

In der Nähe des kritischen Fixpunktes ist die Renormierungstransformation also vollständig durch die Eigenwerte und Eigenvektoren der Matrix M charakterisiert. Nur einer der Eigenwerte ist dabei größer 1, nämlich jener zu dem Eigenvektor, der aus der kritischen Fläche herauszeigt. Alle anderen Eigenvektoren liegen in der kritischen Fläche und habe daher einen Eigenwert kleiner als 1.

1.2.2 Skalierungsform der freien Energiedichte

Wir werden nun sehen, wie sich das kritische Verhalten eines Systems aus den bisherigen Überlegungen ergibt. Der Boltzmann-Faktor des renormierten Systems konnte geschrieben werden als:

$$e^{-\mathcal{H}'(\{\sigma_i'\})} = e^{-\beta G} \sum_{\substack{\text{Konfigurationen}\{\sigma_i\} \\ \text{konsistent mit}\{\sigma_i'\}}} e^{-\mathcal{H}(\{\sigma_i\})}. \tag{1.27}$$

Die Konstante $e^{-\beta G}$ hängt dabei nicht von $\{\sigma_i'\}$ ab, jedoch im allgemeinen von den Parametern $\{H_i'\}$. Summieren wir (1.27) über alle möglichen Spinkonfigurationen σ_i'

des renormierten Systems, ziehen den Logarithmus und teilen durch β, so erhalten wir:

$$F' = F - G \tag{1.28}$$

Da die freie Energie eine extensive Größe ist, können wir sie in der Form $\beta F = N\hat{f}(\{H_i\})$ schreiben. Dabei ist $\hat{f}$ die dimensionslose freie Energiedichte und N die Anzahl der Gitterpunkte. Entsprechend schreibt sich $f' = N'\hat{f}(\{H_i'\})$. Dabei ist $\hat{f}$ dieselbe Funktion, aber bei anderen Argumenten, $N' = N/b^d$ die Anzahl der Gitterpunkte des renormierten Systems und b der bereits oben erwähnte Skalenfakor der Renormierungstransformation. Aus diesen Überlegungen folgt nun, daß auch G eine extensive Größe ist, so daß gilt $\beta G = N\, g(\{H_i\})$. Damit wird Gleichung (1.28) zu

$$\hat{f}(\{H_i'\}) = b^d \left(\hat{f}(\{H_i\}) - g(\{H_i\})\right). \tag{1.29}$$

Wie oben gezeigt wurde, hängt in der Nähe des kritischen Fixpunktes die Renormierungstransformation nur von der Matrix M ab. Wählen wir nun Koordinaten, in denen M diagonal ist, so schreibt sich die Renormierungstransformation einfach als

$$x_i' = \lambda_i x_i \tag{1.30}$$

Damit wird dann Gleichung (1.29) zu

$$\hat{f}(\lambda_1 x_1, \lambda_2 x_2, \ldots) = b^d \left(\hat{f}(x_1, x_2, \ldots) - g(x_1, x_2, \ldots)\right) \tag{1.31}$$

Um nun weitere Folgerungen aus Gleichung (1.31) ziehen zu können, müssen wir eine wichtige Annahme machen und zwar die Annahme der Regularität der Renormierungstransformation. Das heißt, daß das gesamte singuläre Verhalten der freien Energie des renormierten Systems von $\hat{f}(x_1, x_2, \ldots)$ herührt und nicht von $g(x_1, x_2, \ldots)$. Man kann beispielsweise zeigen, daß lineare Blockspintransformationen regulär sind. Unter dieser Annahme wird Gleichung (1.31) zu

$$\hat{f}_{sing}(\lambda_1 x_1, \lambda_2 x_2, \ldots) = b^d \hat{f}_{sing}(x_1, x_2, \ldots). \tag{1.32}$$

Betrachten wir nun zunächst die Situation ohne externes Feld h. Dann gibt es einen Eigenvektor mit Eigenwert größer Eins. Die zugehörige Variable x_1 ist dann in der Nähe des Fixpunktes proportional zu $(T - T_c)$. Der führende Term in $\hat{f}$ gehe nun wie $x_1^{a_1}$. Dann folgt aus Gleichung (1.32)

$$(\lambda_1 x_1)^{a_1} = b^d x_1^{a_1}, \tag{1.33}$$

$$\text{und somit} \quad \lambda_1 = b^{y_1}, \tag{1.34}$$

$$\text{wobei} \quad y_1 = \frac{d}{a_1}. \tag{1.35}$$

Ein analoges Argument für den Fall $T = T_c$ und $h \neq 0$ ergibt dann

$$\hat{f}_{sing} \sim x_2^{a_2}, \tag{1.36}$$

$$\lambda_2 = b^{y_2}, \tag{1.37}$$

$$\text{wobei} \quad y_2 = \frac{d}{a_2}. \tag{1.38}$$

Man bezeichnet dabei Eigenwerte der Renormierungstransformation, die kleiner als eins sind als *irrelevant*, solche die gleich eins sind als *marginal* und solche die größer als eins sind als *relevant*. Indem man nun all dies zusammensetzt, erhält man die *Skalierungsform* der freien Energiedichte:

$$f(x_1, x_2) \equiv \frac{T}{V} \ln Z = b^{-d} f(b^{y_1} x_1, b^{y_2} x_2). \tag{1.39}$$

1.2.3 Kritische Exponenten

Das singuläre Verhalten thermodynamischer Observablen in der Nähe des kritischen Punktes wird durch verschiedene *kritische Exponenten* beschrieben. Ihre Bezeichnung und der Zusammenhang mit den Eigenwerten der Renormierungstransformation werden hier dargestellt. Die Bezeichnungen für die Exponenten leiten sich aus denen der zugehörigen Eigenwerte ab. Man bezeichnet daher solche mit $y < 0$ als irrelevant, solche mit $y = 0$ als marginal und solche mit $y > 0$ als relevant (vgl. Gleichung (1.34)). Eine Lösung von Gleichung (1.39) ist:

$$f(t, h) = t^{d/y_t} \psi(h/t^{y_h/y_t}), \tag{1.40}$$

Mit einer universellen Funktion $\psi(z)$.

Betrachte nun zunächst das Verhalten der spezifischen Wärme bei äußerem Feld gleich Null. Mit $t = |\frac{T-T_c}{T_c}|$ gilt:

$$C_h(t) = -T \left(\frac{\partial^2 f}{\partial T^2} \right)_{h=0} \propto \frac{1}{\alpha}(t^{-\alpha} - 1). \tag{1.41}$$

In dieser Form sind drei verschiedene Verhaltensweisen von C_h in der Nähe von T_c enthalten. Für $\alpha > 0$ eine potenzartige Divergenz, für $\lim_{\alpha \to 0+}$ eine logarithmische Divergenz und für $\alpha < 0$ ein endlicher Peak. Andererseits gilt nach(1.40):

$$\begin{aligned} C_h(t) &\simeq -\frac{1}{T_c} \frac{\partial^2}{\partial t^2} \left[t^{d/y_t} \psi(h/t^{y_h/y_t}) \right] \Big|_{h=0} \\ &= -\frac{\psi(0)}{T_c} \frac{d}{y_t} \left(\frac{d}{y_t} - 1 \right) t^{d/y_t - 2} \end{aligned} \tag{1.42}$$

Daraus folgt, daß $\alpha = 2 - d/y_t$.

Der Ordnungsparameter $\boldsymbol{\phi}$ zeigt folgenes Verhalten:

$$\langle |\boldsymbol{\phi}| \rangle \Big|_{h=0} = -\left(\frac{\partial f}{\partial h} \right) \propto |t|^{\beta} \quad \text{für} \quad t \neq 0. \tag{1.43}$$

Nach (1.40) gilt nun:

$$\langle|\phi|\rangle\Big|_{h=0} = -t^{(d-y_h)/y_t}\psi'(0) \tag{1.44}$$

Daraus folgt, daß $\beta = (d - y_h)/y_t$.

Um das Verhalten des Ordnungsparameters bei T_c in Abhängigkeit vom äußeren Feld h abzuleiten, muß man eine weitere Lösung der Gleichung (1.39) betrachten:

$$f(t,h) = h^{d/y_h}\tilde{\psi}(t/h^{y_t/y_h}) \tag{1.45}$$

Man erwartet folgendes Verhalten:

$$m\Big|_{t=0} = -\left(\frac{\partial f}{\partial h}\right)_{t=0} \propto h^{1/\delta} \tag{1.46}$$

Aus Gleichung (1.45) folgt dann

$$m\Big|_{t=0} = h^{d/y_h-1}\tilde{\psi}(0). \tag{1.47}$$

Also haben wir den Zusammenhang $\delta = y_h/(d - y_h)$.

Die Suszeptibilität verhält sich bei äußerem Feld gleich Null wie

$$\chi\Big|_{h=o} = -\left(\frac{\partial^2 f}{\partial h^2}\right)_t \propto t^{-\gamma} \tag{1.48}$$

Aus (1.40) folgt nun

$$\chi\Big|_{h=o} = t^{(d-2y_h)/y_t}\psi''(0), \tag{1.49}$$

woraus wiederum $\gamma = (2y_h - d)/y_t$ folgt.

Indem man nun ganz ähnliche Argumente wie oben auf Korrelationsfunktionen anwendet, kommt man zu einer Gleichung, die das Verhalten der Korrelationsfunktionen unter Renormierungstransformationen nahe dem kritischen Punkt und für große Abstände beschreibt. Es gilt dann:

$$G_c(r,h,t) = \frac{G_c(r/l, l^{y_h}h, l^{y_t}t)}{l^{d-2+\eta}}, \tag{1.50}$$

was erfüllt werden kann, wenn G_c folgende Struktur hat:

$$G_c(r,h,t) = \frac{1}{r^{d-2+\eta}}g\left(rt^{1/y_t}, \frac{h}{t^{y_h/y_t}}\right). \tag{1.51}$$

An Gleichung (1.51) sieht man, daß die Korrelationslänge ξ durch t^{-1/y_t} gegeben ist. Andererseits definiert man über das Divergenzverhalten der Korrelationslänge einen weiteren kritischen Exponenten

$$\xi \propto t^{-\nu}, \tag{1.52}$$

woraus folgt, daß $\nu = 1/y_t$.

Weil sich alle kritischen Exponenten $\alpha, \beta, \gamma, \delta, \nu$ durch nur zwei Exponenten y_t, y_h ausdrücken lassen, müssen noch Beziehungen zwischen ihnen bestehen. Man erhält daraus vier sogenannte Skalenrelationen:

$$2-\alpha = 2\beta+\gamma \tag{1.53}$$
$$2-\alpha = \beta(\delta+1) \tag{1.54}$$
$$2-\alpha = \nu d \tag{1.55}$$
$$(2-\eta)\nu = \gamma. \tag{1.56}$$

Dabei ist η der in Gleichung (1.51) definierte Exponent und man erhält die Gleichung, indem man ausnutzt, daß

$$\chi(h,t) = \int G_c(r,h,t)dr, \tag{1.57}$$

und somit einen Zusammenhang zwischen γ und η herstellt.
Die bisher dargestellten Zusammenhänge galten nur bei unendlich großem Volumen, also im thermodynamischen Limes. Wie man die kritischen Exponenten trotzdem auf Gittern endlicher Ausdehnung berechnen kann, ist der Inhalt des nächsten Abschnitts.

1.2.4 Finite-Size-Scaling und die χ^2-Methode

Ähnlich wie im Fall eines unendlich großen Gitters kann man auch auf großen Gittern endlicher Ausdehnung Renormierungstransformationen der oben beschriebenen Art durchführen. Groß heißt hierbei, daß die lineare Ausdehnung L des Gitters groß ist gegen die mikroskopische Länge a, das heißt $l = L/a \gg 1$. Da die neuen Spins in lokaler Weise von den alten Spins abhängen, wird die Renormierungstransformation auf dem endlichen Gitter mit der auf dem unendlichen Gitter identisch sein. Nach [2],[3] gilt nun:

$$f(t,h,u_j,l^{-1}) = g(t,h,u_j) + b^{-d} f(b^{y_t}t, b^{y_h}h, b^{y_j}u_j, bl^{-1}), \tag{1.58}$$

dabei sind die u_j irrelevante Felder. Bildet man nun die Differenz

$$\Delta f(l^{-1}) = f(l^{-1}) - f(0),$$

so erfüllt diese eine homogene Gleichung, in der g nicht mehr vorkommt:

$$\Delta f(t,h,u_j,l^{-1}) = b^{-d} \Delta f(b^{y_t}t, b^{y_h}h, b^{y_j}u_j, bl^{-1}). \tag{1.59}$$

Nun gilt aber, daß $f(0) = f_{sing}(0) + f_{reg}$ und $f_{sing}(0)$ erfüllt Gleichung (1.39). Damit wird Gleichung (1.59) zu:

$$f(t,h,u_j,l^{-1}) = f_{reg}(t,h,u_j) + b^{-d}\left(f(b^{y_t}t, b^{h_h}h, b^{y_j}u_j, bl^{-1}) - f_{reg}(b^{y_t}t, b^{y_h}h, b^{y_j}u_j)\right). \tag{1.60}$$

Daran sehen wir, daß der singuläre Anteil der freien Energiedichte die Form

$$f_{sing}(t,h,u_j,l^{-1}) = l^{-d}Q(l^{y_t}t, l^{y_h}h, l^{y_j}u_j) \tag{1.61}$$

hat, mit einer universellen Funktion

$$\begin{aligned} Q(l^{y_t}t, l^{y_h}h, l^{y_j}u_j) &= f\left((l/l_0)^{y_t}t, (l/l_0)^{y_h}h, (l/l_0)^{y_j}u_j, l_0^{-1}\right) \\ &- f_{reg}\left((l/l_0)^{y_t}t, (l/l_0)^{y_h}h, (l/l_0)^{y_j}u_j\right). \end{aligned} \tag{1.62}$$

Gleichung (1.61) ist die Basis für *Finite-Size-Scaling*. Der Ordnungsparameter und die Suszeptibilität erhält man aus f_{sing} durch Ableiten nach dem äußeren Feld h bei $h = 0$. Unter Benutzung der Definitionen der kritischen Exponenten und Gleichung (1.61) erhält man

$$O(t,u_j,l) = l^{\rho/\nu}Q_O(l^{1/\nu}t, l^{-\omega_j}u_j). \tag{1.63}$$

Dabei steht O für ϕ und χ. Für den Ordnungsparameter ist $\rho = -\beta$ und für die Suszeptibilität ist $\rho = \gamma$. Für die irrelevanten Exponenten wurde $y_j = -\omega_j$ gesetzt. Wenn man nun die irrelevanten Felder u_j vernachlässigen kann, so erhält man bei $t = 0$ ein einfaches Verhalten der Observablen. Bemerkenswert dabei ist, daß das Verhalten des endlichen Systems vollständig durch die Exponenten der Theorie im Unendlichen-Volumen-Limes bestimmt wird. Damit können Simulationen auf endlichen Gittern dazu genutzt werden, die kritischen Exponenten des unendlichen Systems zu bestimmen. Die Schwierigkeit besteht nun darin, die kritische Temperatur T_c zu bestimmen. Dazu gibt es mehrere Verfahren:

Man betrachte beispielsweise die Suszeptibilität. Die universelle Skalenfunktion Q_χ muß bei irgendeinem Argument z_0 ein Maximum haben (hier und im folgenden werden die irrelevanten Skalenfelder vernachlässigt). Für den Wert T_* an dem die Suszeptibilität auf dem endlichen Gitter maximal wird gilt dann

$$\chi_{max} = l^{\gamma/\nu}Q(z_0), \tag{1.64}$$

also wieder ein Finite-Size-Scaling Formel. Andererseits muß natürlich gelten:

$$\frac{T_*(l) - T_c}{T_c} l^{1/\nu} = z_0 \tag{1.65}$$

$$\text{woraus folgt} \quad T_*(l) = T_c + \frac{const}{l^{1/\nu}}, \tag{1.66}$$

das heißt ein Geraden-Fit von $T_*(l)$ über $1/l^{1/\nu}$ gibt T_c als y-Achsenabschnitt. Diese Methode hat den Nachteil, daß sie die Kenntnis von ν voraussetzt, oder einen Zwei-Parameter-Fit darstellt.

Eine Methode, die nicht auf die Kenntnis von ν angewiesen ist, wurde von Binder in [4] vorgeschlagen. Dazu betrachtet man folgende Größe:

$$U_l = -\frac{1}{3} \left. \frac{\partial^4 f_s}{\partial h^4} \right|_{h=0} \chi^{-2} l^{-d}. \tag{1.67}$$

Mit Gleichung (1.61) sieht man, daß U_l eine Skalenfunktion ist. Man nennt U_l die Binderkumulante. Auf einem endlichen Gitter ist U_l gegeben durch

$$U_l = 1 - \frac{1}{3} \frac{\langle \phi^4 \rangle}{\langle \phi^2 \rangle^2}. \tag{1.68}$$

Der Wert von U_l bei T_c ist universell, weil U_l eine Skalenfunktion ist. Darauf begründet sich nun die Methode Binders. Im Prinzip schneiden sich die Binderkumulanten zu verschiedener Gittergrösse bei $T = T_c$ in einem Punkt. Dies gilt jedoch nur, wenn man irrelevante Felder vernachlässigen kann. Man kann sich aber gerade die Abhängikeit des Schnittpunktes von den irrelevanten Feldern zunutze machen, denn diese Abhängigkeit ist im Prinzip bekannt. Binder zeigt in [4] daß für die Abweichung des Schnittpunktes T_* der Binderkumulanten zu l und bl von T_c gilt:

$$T_* - T_c \sim \frac{1}{\ln b}. \tag{1.69}$$

Ein Geraden-Fit von $T_*(l, l')$ über $1/\ln(l'/l)$ für verschiedene Gittergrößen l' gibt dann T_c als y-Achsenabschnitt.

Eine weitere Methode ist die in [5] vorgestellte χ^2-Methode . Indem man in Gleichung (1.63) die Skalenfunktion Q_O um $t = 0$ entwickelt und nur die Abhängigkeit vom größten irrelevanten Exponenten $u_1 = -\omega$ berücksichtigt, erhält man

$$O(t, l) = l^{\rho/\nu}[c_0 + (c_1 + c_2 l^{-\omega}) t l^{1/\nu} + c_3 l^{-\omega}]. \tag{1.70}$$

Für $t = 0$ erhält man also

$$O(t = 0, l) = l^{\rho/\nu}[c_0 + c_3 l^{-\omega}], \tag{1.71}$$

was für große Gitter bei einem log-log Fit eine Gerade mit Steigung ρ/ν ergibt. Da für $t \neq 0$ der $tl^{1/\nu}$-Term das l-Verhalten stark verändert, wird der kritische Punkt durch die Bedingung definiert, daß ein Fit zum führenden l-Verhalten das minimale χ^2 hat.

1.2.5 Finite-Mass-Scaling

Die bisherige Diskussion kritischer Phänomene bezog sich immer auf den Fall bei äußerem Feld gleich Null. In Simulationen der QCD mit dynamischen Fermionen ist es aus algorithmischen Notwendigkeiten heraus nicht möglich, mit verschwindender Quarkmasse zu rechnen, was einem äußeren Feld entspricht. Deshalb muß man auch den Fall des nicht verschwindenden äußeren Feldes behandeln. Dazu betrachtet man zunächst noch einmal das Skalenverhalten der Korrelationsfunktionen in Form von Gleichung (1.50). Eine weitere Lösung dieser Gleichung neben Gleichung (1.51) ist

$$G_c(r,h,t) = \frac{1}{r^{d-2+\eta}} g\left(rh^{1/y_h}, \frac{t}{h^{y_t/y_h}}\right), \tag{1.72}$$

woran man sieht, daß selbst bei $t = 0$ die Korrelationslänge nicht divergiert, sondern durch $\xi \propto h^{-\nu/(\beta+\gamma)}$ gegeben ist. Auf einem endlichen Gitter der Länge l muß man nun betrachten in welchem Verhältnis die Ausdehnung des Gitters und die durch das äußere Feld vorgegebene Skala stehen. Gilt $l \gg \xi$, so wird man nichts von der Endlichkeit des Gitters bemerken und kann getrost die Skalenformeln des unendlichen Gitters ansetzen und daraus Konsequenzen ableiten.
Betrachte dazu die Skalenform der freien Energiedichte in Gleichung (1.40). Die Suszeptibilität bei nichtverschwindendem äußeren Feld ist gegeben durch

$$\chi = -\left(\frac{\partial^2 f}{\partial h^2}\right) = t^{(d-2y_h)/y)t} \psi''(h/t^{y_h/y_t}). \tag{1.73}$$

Nun habe die universelle Skalenfunktion ψ'' ein Maximum bei z_0. Zusammen mit den Definitionen für die kritischen Exponenten folgt dann:

$$h/t^{y_h/y_t} = z_0 \Rightarrow t_{max} = c\, h^{y_t/y_h} = c\, h^{1/\delta\beta} \Rightarrow \chi(t_{max}) = c_h\, h^{(d-2y_h)/y_h} = c_h\, h^{1/\delta-1}. \tag{1.74}$$

Man kann auf dieselbe Weise auch das Skalenverhalten von gemischten Ableitungen betrachten. Da die universellen Skalenfunktionen nur von $h/t^{y_h/y_t}$ abhängen, gilt immer $t_{max} \propto h^{1/\delta\beta}$. Nun gilt

$$\begin{aligned} \chi_t &= \frac{\partial^2}{\partial h \partial t} f(t,h) = \frac{d}{y_t} t^{(d-y_h)/y_t-1} \psi'(h/t^{y_h/y_t}) - \frac{y_h}{y_t} t^{(d-2y_h)/y_t-1} \psi''(h/t^{y_h/y_t}) \\ &\Rightarrow \chi_t(t_{max}) = c_t\, h^{(\beta-1)/\beta\delta}. \end{aligned} \tag{1.75}$$

Man kann diese Ansätze jedoch nur in einem gewissen Fenster für h ansetzen. Wird das äußere Feld zu klein, wird die dadurch induzierte Korrelationslänge größer als die Ausdehnung des Gitters und man müßte die resultierenden Volumeneffekte durch einen geeigneten Finite-Size-Scaling Ansatz bei endlichem äußeren Feld behandeln.

1.2.6 Das Landau-Ginzburg-Modell

Der erste Schritt auf dem Wege zu einer quantitativen Theorie eines Phasenübergangs ist das Auffinden eines *Ordnungsparameters*. Einer Grösse, deren Erwartungswert auf der einen Seite des Phasenübergangs verschwindet (fast unweigerlich die

Hochtemperaturphase) und auf der anderen Seite einen Wert ungleich Null annimmt. Ein wichtiges Beispiel ist die mittlere spontane Magnetisierung $\boldsymbol{\phi}(x)$ in einem kleinen Volumen um $\mathbf{x}$. Das Landau-Ginzburg-Modell ist eine effektive Theorie für den Ordnungsparameter. Die Hamiltondichte lautet:

$$\mathcal{H}_{LG} = \frac{1}{2}\alpha^2|\boldsymbol{\nabla}\boldsymbol{\phi}|^2 + \frac{1}{2}\mu^2|\boldsymbol{\phi}|^2 + \frac{1}{4!}\lambda(|\boldsymbol{\phi}|^2)^2 - \beta\boldsymbol{B}\cdot\boldsymbol{\phi} \tag{1.76}$$

Der erste Term bedeutet, daß räumliche Fluktuationen Energie kosten. Der Vorfaktor des zweiten Terms ist temperaturabhängig und treibt den Phasenübergang. Der Vorfaktor des dritten Terms muß positiv sein, damit die Energie von unten beschränkt ist. Dieser Term verhindert Fluktuationen hin zu großen $\boldsymbol{\phi}$. Der vierte Term ist die Energie aus der Kopplung an ein äußeres Feld $\boldsymbol{B}$. Es stellt sich an dieser Stelle die Frage, warum man nicht noch weitere Terme, beispielsweise einen Term der Form $|\boldsymbol{\phi}|^6$, dazu addiert. Die Antwort ergibt sich aus Überlegungen im Rahmen der oben besprochenen Ortsraumrenormierung. Die weitern Terme führen zu irrelevanten Eigenwerten der Renormierungsgruppentransformation. Das heißt sie sind für Korrekturen zum Skalenverhalten verantwortlich, ändern die relevanten Parameter aber nicht und führen zu Theorien in derselben Universalitätsklasse. Allgemein kann man sagen, daß die Universalitätsklasse eines Systems nur von der Dimensionalität d des Systems und der Symmetriegruppe des Ordnungsparameters abhängt. Dies macht man sich zunutze, wenn man den Phasenübergang komplizierter Systeme untersuchen will. Man versucht dabei ein einfaches Modell zu finden, welches in derselben Universalitätsklasse wie das zu untersuchende liegt und bestimmt die kritischen Exponenten in dem vereinfachten Modell. Dieser Weg wurde auch im Fall der 2-flavour-QCD beschritten und führt auf ein dreidimensionales O(4)-symmetrisches Heisenberg Modell, wie weiter unten gezeigt werden soll.

1.2.7 Dimensionale Reduzierung einer skalaren Feldtheorie

Ein weiteres wichtiges Konzept auf dem Wege zu einer effektiven Theorie für den chiralen Phasenübergang ist das Konzept der *dimensionalen Reduzierung*. Der entscheidende Punkt hierbei ist, daß das kritische Verhalten eines vierdimensionalen Systems bei endlicher Temperatur durch ein effektives dreidimensionales Modell beschrieben werden kann. Dieses soll am Beispiel einer skalaren, reellen ϕ^4-Theorie erläutert werden.Betrachte dazu nun die folgende Lagrangedichte:

$$\mathcal{L} = -\frac{1}{2}\left(\partial_\nu\phi\partial_\nu\phi + \mu^2\phi^2\right) + \frac{\lambda}{4}\phi^4. \tag{1.77}$$

Nun führt man eine Fouriertransformation der Felder bezüglich der Zeitkoordinate durch. Da für eine Feldtheorie bei endlicher Temperatur im Pfadintegralformalismus die Temperatur T zu einer Kompaktifizierung der Zeitrichtung zum Intervall $[0, \beta]$ mit $\beta = 1/T$ führt, erhält man

$$\phi(x,t) = \beta^{1/2} \sum_{n=-\infty}^{+\infty} e^{i\omega_n t} \phi_n(x) \tag{1.78}$$

Dabei sind die $\omega_n = 2\pi n T$ die sogenannten Matsubara-Frequenzen und es gilt

$$\phi_n^*(x) = \phi_{-n}(x),$$

da es sich um ein reeles Feld handelt. Setzt man dies in Gleichung (1.77) ein so erhält man

$$\begin{aligned} \mathcal{L}(x,t) &= -\frac{1}{2} \Bigg[\left(\partial_\nu \beta^{1/2} \sum_{n=-\infty}^{+\infty} e^{i\omega_n t} \phi_n(x) \right) \left(\partial_\nu \beta^{1/2} \sum_{m=-\infty}^{+\infty} e^{i\omega_m t} \phi_m(x) \right) \\ &+ \mu^2 \beta \sum_{m,n} e^{i(\omega_n + \omega_m)t} \phi_n(x) \phi_m(x) \Bigg] \\ &+ \frac{\lambda}{4} \beta^2 \sum_{k,l,m,n} e^{i(\omega_k + \omega_l + \omega_m + \omega_n)t} \phi_k(x) \phi_l(x) \phi_m(x) \phi_n(x). \end{aligned} \tag{1.79}$$

Führt man nun die zeitliche Integration $\int_0^{1/T} dt$ aus, so ergibt sich als Lagrangedichte für die $\phi(x)$

$$\begin{aligned} \mathcal{L}(x) \equiv \int_0^\beta \mathcal{L}(x,t)\, dt = &- \frac{1}{2}\beta^2 \left[\sum_{n=0}^{\infty} \partial_i \phi_n(x) \partial_i \phi_n^*(x) + \sum_{n=0}^{\infty} (\mu^2 + \omega_n^2) \phi_n(x) \phi_n^*(x) \right] \\ &+ \frac{\lambda}{4} \beta^3 \sum_{k,l,m,n} \delta_{k+l+n+m,0} \phi_k(x) \phi_l(x) \phi_m(x) \phi_n(x). \end{aligned} \tag{1.80}$$

Die kritische Temperatur ist gegeben durch $\mu^2(T_c) = 0$. Bis auf die Nullmode $\phi_0(x)$ bleiben demnach alle Freiheitsgrade des Systems am Phasenübergang massiv. Da ein Phasenübergang zweiter Ordnung durch eine divergiernde Korrelationslänge des Ordungsparameters charakterisiert ist und die Korrelationslänge durch die inverse Masse gegeben ist,

$$\langle \phi(x) \phi(y) \rangle \propto e^{-\mu|x-y|} = e^{-x/\xi} \to \xi = \mu^{-1}, \tag{1.81}$$

identifiziert man die Nullmode des Feldes $\phi(x,t)$ mit dem Ordnungsparameter. In der Tat koppelt nur die Nullmode an ein symmetriebrechendes äußeres Feld h. Setzt man nämlich für den symmetriebrechenden Term $\mathcal{L}_{SB}(x,t) = h\phi(x,t)$, benutzt die Fourierentwicklung von $\phi(x,t)$ und integriert über die Zeit, erhält man

$$\mathcal{L}_{SB}(x) \equiv \int_0^\beta \mathcal{L}_{SB}(x,t)\, dt = \beta^{1/2} \int_0^\beta h \sum_{n=-\infty}^{\infty} e^{i\omega_n t} \phi_n(x) = \beta^{1/2} h \phi_0(x) \tag{1.82}$$

Man vernachlässigt nun die Kopplung der Nullmode mit den massiven Moden und erhält eine effektive dreidimensionale Theorie des Ordnungsparameters:

$$\mathcal{L}_{eff} = -\frac{1}{2}\beta^2 \left[\partial_i \phi(x) \partial_i \phi(x) + \mu^2 \phi^2(x) \right] + \frac{\lambda}{4} \beta^3 \phi^4(x). \tag{1.83}$$

1.2.8 QCD und der O(4)-Magnet

An dieser Stelle sollen die Argumente zusammengeführt werden, welche zu der Vermutung beitragen, daß QCD mit zwei Quarkflavourn in derselben Universalitätsklasse liegt wie das dreidimensionale O(4)-symmetrische Heisenbergmodell[11]. Man sucht also nach einem effektiven Modell für den chiralen Phasenübergang, das nur noch die relevanten Freiheitsgrade enthält. Dies ist gerade der Ordnungsparameter, der am Phasenübergang langreichweitige Korrelationen entwickelt. Damit wird die Theorie bei T_c skaleninvariant, das heißt es handelt sich um die Fixpunkttheorie nach wiederholten Renormierungen. Der Renormierungsgruppenzugang sagt auch aus, daß die Fixpunkttheorie nur von der Raumdimension d und der Symmetrie der Theorie abhängt. Mit Hilfe dimensionaler Reduzierung kommt man zu dem Schluß eine dreidimensionale Theorie zu konstruieren. Was bleibt ist die Identifikation des Ordnungsparameters. Der einfachste Ordnungsparameter ist der Erwartungswert des chiralen Kondensats:

$$\mathcal{M}_{i,j} = \langle M_{i,j} \rangle = \langle \bar{\Psi}_{L,i} \Psi_{R,j} \rangle \quad \text{und} \mathcal{M}^\dagger_{i,j} = \langle M^\dagger_{i,j} \rangle = \langle \bar{\Psi}_{R,i} \Psi_{L,j} \rangle . \tag{1.84}$$

Dabei ist $\mathcal{M}$ eine Matrix im Flavour-Raum. Der symmetriebrechende Term ist durch M wie folgt gegeben:

$$\mathcal{L}_{Symm.-Brech.} = Tr\left(M H^\dagger + M^\dagger H \right) . \tag{1.85}$$

Dabei ist H die Quarkmassenmatrix. Daran erkennt man auch den Zusammenhang zwischen der Quarkmasse und einem äußeren Feld. Unter einer chiralen $SU(N)_L \times SU(N)_R \times U(1)_V$-Transformation geht $\mathcal{M}$ über in

$$\mathcal{M} \longrightarrow e^{i\alpha} U^\dagger \mathcal{M} V \quad \text{mit} \quad U, V \in SU(N). \tag{1.86}$$

Als effektive Theorie macht man einen Landau-Ginzburg-artigen Ansatz:

$$F = \int d^3x \left[Tr(\partial_i \mathcal{M}^\dagger \partial_i \mathcal{M}) + \mu^2 Tr(\mathcal{M}^\dagger \mathcal{M}) + \lambda_1 Tr(\mathcal{M}^\dagger \mathcal{M})^2 + \lambda_2 (Tr(\mathcal{M}^\dagger \mathcal{M}))^2 \right] . \tag{1.87}$$

Diese Formulierung besitzt jedoch noch zuviel Symmetrie, nämlich die volle $U(2) \times U(2)$-Symmetrie. Da aber die Universalitätsklasse empfindlich von der Symmetrie abhängt, addiert man noch den Term

$$c \cdot (det\, \mathcal{M} + det\, \mathcal{M}^\dagger) \tag{1.88}$$

der die Symmetrie explizit zur chiralen $SU(N)_L \times SU(N)_R \times U(1)_V$-Symmetrie herunterbricht. Für den Fall $N_f = 2$ gibt es einen Trick. Man beschränke $\mathcal{M}$ auf Vielfache von unitären Matrizen mit positiver Determinante. Unter

$$\mathcal{M} \longrightarrow U^\dagger \mathcal{M} V \tag{1.89}$$

bleiben solche Matrizen nur dann in dieser Klasse, wenn U und V gleiche Phasen haben und das beseitigt die ungewollte axiale U(1)-Symmetrie. Mit Hilfe der Pauli-Matrizen kann man die Matrix $\mathcal{M}$ nun als

$$\mathcal{M} = \sigma + i\vec{\pi} \cdot \vec{\tau} \tag{1.90}$$

parametrisieren. Faßt man die vier Parameter als vierkomponentigen Vektor auf

$$\phi^\alpha \equiv (\sigma, \vec{\pi}), \tag{1.91}$$

so sind die Transformationen (1.89) gerade O(4)-Drehungen im Raum der ϕ. Der Ordnungsparameter des chiralen Phasenübergangs hat also dieselben Symmetrien wie ein 3-dimensionales Heisenbergmodell. Dieses Modell ist nun analytisch gut untersucht und die Existenz eines infrarotstabilen Fixpunktes der Renormierungsgruppe wurde nachgewiesen. Daher kann der O(4)-symmetrische Heisenbergmagnet als Modell für einen zweiter Ordnung chiralen Phasenübergang in der QCD mit zwei masselosen Quarks dienen. Ein Wort der Vorsicht sei jedoch noch angebracht. Man kann nicht sicher sein, daß der Phasenübergang tatsächlich zweiter Ordnung ist. Zwar existiert ein Modell mit den gleichen Symmetrien und dieses beschreibt einen Phasenübergang zweiter Ordnung, aber es ist prinzipiell möglich, daß die QCD in einem Parameterbereich definiert ist, der unter Renormierungstransformationen nicht zu dem Fixpunkt renormiert wird, sondern davon weg. Dadurch würde der Phasenübergang dann erster Ordnung. Alles was man tun kann, ist die Hypothese auszuwerten und mit Simulationen der QCD und des O(4)-Modells zu vergleichen.

Kapitel 2

Numerische Methoden

2.1 Die numerische Berechnung thermischerEr- wartungswerte

2.1.1 Monte Carlo Integration

Ziel einer Computersimulation im Zusammenhang mit kritischen Phänomenen ist es, thermische Erwartungswerte von interessanten Observablen zu berechnen:

$$
\begin{aligned}
\langle X \rangle_P &= \sum X_\alpha p_\alpha \\
\text{wobei} \quad p_\alpha &= \frac{e^{-\beta E(\alpha)}}{Z} \\
\text{und} \quad Z &= \sum_{alle\,Konf.} e^{-\beta E(\alpha)}
\end{aligned} \tag{2.1}
$$

Dabei bedeutet X_α den Wert der Observablen X bei einer bestimmten Konfiguration α und p_α die Wahrscheinlichkeit für das Auftreten dieser Konfiguration. Nun wächst die Anzahl möglicher Konfigurationen exponentiell mit der Größe des Systems, so daß es selbst bei einfachen Systemen wie dem Ising-Modell bald unmöglich wird, den Erwartungswert exakt zu berechnen. Die Methode der *Monte Carlo Integration* besteht nun darin, den Erwartungswert zu schätzen, indem man zufällige Konfigurationen α_i erzeugt und (2.1) für diesen Satz berechnet. Damit hat man eine erwartungstreue Schätzung für den Erwarungswert. Man hat jedoch nach wie vor ein Problem. Der Boltzmann-Faktor $e^{-\beta E(\alpha)}$ variiert sehr stark auf verschiedenen Konfigurationen. Das führt dazu, daß die Varianz der Schätzung schlecht wird und man andererseits viel Computerzeit in die Erzeugung von Konfigurationen stecken muß, die aufgrund ihres statistischen Gewichts kaum zum Erwartungswert beitragen.

2.1.2 Importance Sampling

Man kann dieses Dilemma lösen, wenn man ein Ensemble von Konfigurationen $\{\alpha_i\}_{i=1}^N$ erzeugen könnte, so daß die Wahrscheinlichkeit eine Konfiguration α in dem Ensemble zu finden gerade dem Boltzmann-Faktor $e^{-\beta E(\alpha)}$ proportional wäre. Dann ist nämlich der Erwartungswert der Observablen X einfach gegeben durch

$$\langle X \rangle = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^{N} X_{\alpha_i}. \tag{2.2}$$

Das ist die Methode des *Importance Sampling*. Als Methode zur Erzeugung eines solchen wünschenswerten Ensembles bedient man sich der Theorie der Markovketten.

2.1.3 Markov-Ketten

Sei Q eine stochastische Matrix, das bedeutet, daß alle Spaltensummen gleich eins sind. Man interpretiert $Q_{i,j}$ als Übergangswahrscheinlichkeit vom Zustand j zur Zeit t in den Zustand i zur Zeit $t+1$. Die Bedingung an die Spaltensummen bedeutet dann, daß die Wahrscheinlichkeit zu irgendeinem Zustand zu gelangen gleich eins ist. Das Produkt Q^2 ist wieder eine stochastische Matrix. Sie repräsentiert die Übergangswahrscheinlichkeiten nach zwei Zeitschritten. Sei nun p ein Vektor mit $\sum_i p_i = 1$. Man interpretiert p als Wahrscheinlichkeit auf irgendeinem Zustandsraum S. Der Ergodensatz sagt nun: Wenn Q^N für irgendein N nur positive Einträge hat, man sagt dann, daß Q^N ergodisch ist, so existiert genau eine stationäre Verteilung p, das heißt $Qp = p$, so daß für alle Startverteilungen p' gilt:

$$\lim_{n\to\infty} Q^n p' = p. \tag{2.3}$$

Der Physiker benutzt diesen Sachverhalt nun folgendermaßen: Der Zustandsraum sei der Raum aller physikalischen Zustände eines thermodynamischen Systems. Man erfinde nun einen Markov-Prozess, so daß die zugehörige Matrix der Übergangswahrscheinlichkeiten die Verteilung nach dem Boltzmann-Faktor als stationäre Verteilung besitzt. Dann kann man mit einer beliebigen Konfiguration starten, das heißt $p_i = \delta_{ij}\alpha_j$ und nach einer gewissen Thermalisierungszeit, finden wir eine Konfiguration α_i in dem erzeugten Ensemble genau mit dem ihr zugeordneten Boltzmann-Gewicht.

2.1.4 Detailed Balance und Metropolis-Algorithmus

Das zu lösende Problem ist also darauf reduziert worden, eine Methode zu finden neue Konfigurationen zu erzeugen, so daß das Gibbs'sche Ensemble das stationäre Ensemble ist. Dazu ist folgende Bedingung hinreichend:

$$Q(\alpha_j \leftarrow \alpha_i)e^{-\beta E(\alpha_i)} = Q(\alpha_i \leftarrow \alpha_j)e^{-\beta E(\alpha_j)}. \tag{2.4}$$

Summiert man nämlich in Gleichung (2.4) über i, so sieht man, daß Q, weil die Spaltensummen alle gleich eins sind, den Boltzmann-Faktor als stationäre Verteilung hat. Eine sehr einfache, aber leicht zu implementierende Wahl für $Q(\alpha_j \leftarrow \alpha_i)$ ist die von Metropolis in [6] angegebene:

$$Q(\alpha_j \leftarrow \alpha_i) = \begin{cases} \mathcal{N}^{-1} & \text{falls} \quad e^{-\beta E(\alpha_j)} \geq e^{-\beta E(\alpha_i)} \\ \mathcal{N}^{-1} e^{-\beta(E(\alpha_j)-E(\alpha_i))} & \text{falls} \quad e^{-\beta E(\alpha_j)} < e^{-\beta E(\alpha_i)} \end{cases} \tag{2.5}$$

Sie bedeutet, daß die neue Konfiguration angenommen wird, wenn sie die Energie des Systems verringert. Erhöht sie die Energie des Systems, so wird sie nur mit einer Wahrscheinlichkeit angenommen, die gleich dem Verhältnis der Boltzmann-Faktoren ist. In einer tatsächlichen Simulation wird man jedoch nur lokale Änderungen an den Konfigurationen vornehmen, um die Akzeptanzrate hoch zu halten. Ein einzelner solcher Metroplis-Schritt ist zwar nicht mehr ergodisch, aber ein Sweep durch das ganze Gitter ist dann wieder ergodisch.

2.1.5 Critical Slowing Down

Da man bei jedem Update-Schritt, jeweils nur einen Spin verändert, sind die Konfigurationen auf denen die Observablen gemessen werden, auch nach einem Sweep durch das ganze Gitter, nicht statistisch unabhängig. Man muß nun unterscheiden zwischen dem Erwartungswert einer Größe, das ist woran man wirklich interessiert ist, und dem Ensemblemittel, das ist was man tatsächlich mißt. Betrachte nun eine Folge von N Messungen x_i einer Größe x. Dann sei X der Erwartungswert von x und $\bar{x}$ das Ensemblemittel

$$X = E(x_i) \qquad \text{und} \qquad \bar{x} = \frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N} x_i, \tag{2.6}$$

Der Erwartungswert von $\bar{x}$ ist natürlich auch X. Die Varianz eines jeden x_i ist

$$\sigma^2 = E((x_i - X)^2) = E(x_i^2) - X^2 \tag{2.7}$$

und die Varianz des Ensemblemittels ist

$$\Delta^2 = E((\bar{x} - X)^2) = E(\bar{x}^2) - X^2 \tag{2.8}$$

Entwickelt man nun die Doppelsumme in $E(\bar{x}^2)$ und spaltet sie in einen diagonalen und einen nichtdiagonalen Anteil, so erhält man mit

$$\rho_p = \frac{1}{N^2} \sum_{\substack{i>j \\ i-j=p}} E((x_i - X)(x_j - X)) = \frac{(N-p)}{N^2} E(x_i x_{i+p}) - X^2 \qquad (2.9)$$

$$\Delta^2 = \rho_0 + \sum_{p=1}^{N-1} 2\rho_p = \rho_0 \cdot 2 \left(\frac{1}{2} + \sum_{p=1}^{N-1} \rho_p / \rho_0 \right). \qquad (2.10)$$

Da nun $\rho_0 = \sigma^2/N$ ist, gilt mit $\tau_{x,int} = 1/2 + \sum_{p=1}^{\infty} \rho_p/\rho_0$

$$\Delta^2 = \frac{\sigma^2}{N} \cdot 2 \left(\frac{1}{2} + \sum_{p=1}^{N-1} \rho_p/\rho_0 \right) \approx \frac{\sigma^2}{N} \cdot 2\tau_{x,int}. \qquad (2.11)$$

Man bezeichnet $\tau_{x,int}$ als die integrierte Autokorrelationszeit der Größe x. Sie ist gleich der Anzahl von Iterationen, die notwendig ist, um eine statistisch unabhängige Konfiguration zu erzeugen. Critical Slowing down bedeutet nun, das Explodieren der integrierten Autokorrelationszeit am Phasenübergang des Systems:

$$\tau_{x,int} \propto \xi^z. \qquad (2.12)$$

Man nennt z einen dynamischen kritischen Exponenten. Algorithmen mit lokalen Updates, wie der oben beschriebene Metropolis-Algorithmus haben $z \approx 2$. Auch wenn auf einem endlichen Gitter die Korrelationslänge ξ durch die Gittergröße l bschränkt bleibt, wird es doch immer schwieriger auf großen Gittern in der Nähe des Phasenübergangs zu rechnen. Der physikalische Grund für critical slowing down ist recht einsichtig. Am Phasenübergang entwickeln sich Korrelationen auf allen Skalen. Das bedeutet, daß ganze Bereiche (Cluster) von Spins in die gleiche Richtung zeigen. Eine statistisch unabhängige Konfiguration wird erreicht, indem man einen ganzem solchen Cluster auf einmal umklappt, was die Energie des Systems selbst kaum ändert. Bei einem lokalen Update muß man aber einen Spin nach dem anderen herumdrehen, was recht unwahrscheinlich ist, da ja alle Spins eines Clusters in eine Richtung zeigen. Beträchtlicher Erfindungsreichtum ist notwendig, um einen Algorithmus zu erfinden, der in der Lage ist, ganze Bereiche von Spins umzuklappen, gleichzeitig ergodisch ist und detailed Balance erfüllt. Ein solcher Algorithmus ist in [7] von U.Wolff vorgeschlagen worden.

2.1.6 Der Cluster-Algorithmus nach Wolff

Der von Wolff vorgeschlagene Algorithmus verwendet eine Verallgemeinerung des Spinflips im Ising-Modell auf $O(n)$-symmetrische Modelle. Die Wirkung sei gegeben durch

$$S = \sum_{\langle x,y \rangle} \boldsymbol{\sigma}_x \cdot \boldsymbol{\sigma}_y, \qquad (2.13)$$

dabei erstreckt sich die Summe über Paare nächster Nachbarn und die $\boldsymbol{\sigma}$ sind Vektoren aus der S_{n-1}. Sei nun $\boldsymbol{r}$ ebenfalls aus S_{n-1}. Dann ist eine Reflexion an der Hyperfläche orthogonal zu $\boldsymbol{r}$ gegeben durch

$$R(\boldsymbol{r})\boldsymbol{\sigma}_x = \boldsymbol{\sigma}_x - 2(\boldsymbol{\sigma}_x \cdot \boldsymbol{r})\boldsymbol{r}. \tag{2.14}$$

Der Update-Schritt des Cluster-Algorithmus besteht aus folgenden Einzelschritten:

- Wähle eine Zufallsrichtung $\boldsymbol{r} \in S_{n-1}$ und einen zufälligen Site als ersten Punkt des Clusters C.
- Für einen Link an der Oberfläche des Clusters, $\partial C = \{(\mathbf{x}, \mathbf{y}) | \mathbf{x} \in C, \mathbf{y} \notin C\}$ wird der Site $\mathbf{y}$ mit Wahrscheinlichkeit
$$P(\boldsymbol{\sigma}_x, \boldsymbol{\sigma}_y) = 1 - \exp(\min\{0, 2\beta(\boldsymbol{r} \cdot \boldsymbol{\sigma}_x)(\boldsymbol{r} \cdot \boldsymbol{\sigma}_y)\}) \tag{2.15}$$
zum Cluster hinzugefügt.
- Wiederhole den vorhergehenden Schritt solange, bis keine neuen Sites mehr hinzukommen.
- Reflektiere jeden Spin im Cluster an der zur zufällig gewählten Richtung $\boldsymbol{r}$ orthogonalen Ebene
$$\boldsymbol{\sigma}'_x = R(\boldsymbol{r})\boldsymbol{\sigma}_x \quad \text{für} \boldsymbol{x} \in C \tag{2.16}$$

Die Ergodizität des Algorithmus ist offensichtlich, da es immer möglich ist, daß ein Cluster nur aus einem Spin besteht, und jede beliebige Konfiguration kann durch eine Reihe von Reflexionen von Spins erreicht werden. Wenn man nun eine Zufallsrichtung $\boldsymbol{r}$ wählt und den Cluster in einer Region startet, in der die Spins alle in etwa orthogonal zu $\boldsymbol{r}$ sind, so ist der verallgemeinerte Spinflip nur eine kleine Deformation. Die Wahrscheinlichkeiten einen weiteren Spin zum Cluster zu addieren sind klein und deshalb auch die Cluster selbst. Ist die Richtung $\boldsymbol{r}$ jedoch (anti)parallel zur lokalen Spinausrichtung, so wird der Cluster wachsen bis er eine energetisch akzeptable Oberfläche erreicht hat. Dadurch werden aufeinanderfolgende Konfiguration praktisch dekorreliert. Die numerischen Studien dieses Algorithmus [10]ergeben das völlige Verschwinden des Critical Slowing down und somit $z = 0$.

2.2 Die Auswertung von Monte Carlo Daten

2.2.1 Die Ferrenberg Swendsen Methode

Um die oben beschriebenen Methoden zur Bestimmung der kritischen Temperatur und der kritischen Exponenten anwenden zu können, ist es beispielsweise notwendig Peakpositionen und Peakhöhen oder Schnittpunkte verschiedener Observablen genau zu bestimmen. Die direkteste Methode wäre es, bei verschieden Kopplungen die notwendigen Observablen sehr genau zu messen und daraus die fraglichen Größen zu extrahieren. Das ist auch mit beträchtlichem Aufwand getan worden. In [8],[9] wird jedoch gezeigt, daß man aus einer einzelnen Simulation viel mehr Information extrahieren kann, als man bis dahin gedacht hatte. Dies beruht darauf, daß die Wahrscheinlichkeitsverteilung $P_\beta(S)$ der Energie im wesentlichen durch die Zustandsdichte $W(S)$ bestimmt wird, die wiederum nicht von der Kopplung β abhängt:

$$\begin{aligned} P_\beta(S) &= \frac{1}{Z(\beta)} W(S) e^{-\beta S} && (2.17) \\ \text{wobei} \quad Z(\beta) &= \sum_{Konf.\,\sigma} e^{-\beta H(\sigma)} = \sum_S W(S) e^{-\beta S} && (2.18) \\ \text{mit} \quad W(S) &= \sum_{Konf.\,\sigma} \delta(H(\sigma) - S) && (2.19) \end{aligned}$$

Nun gilt

$$\begin{aligned} Z(\beta') &= \sum_S W(S) e^{-\beta' S} \\ &= \sum_S W(S) e^{-\beta S} e^{-(\beta'-\beta)S} \\ &= Z(\beta) \sum_S P_\beta(S) e^{-(\beta'-\beta)S}. && (2.20) \end{aligned}$$

Daraus folgt

$$\begin{aligned} P_{\beta'}(S) &= \frac{1}{Z(\beta')} W(S) e^{-\beta' S} \\ &= \frac{1}{Z(\beta)} W(S) e^{-\beta S} \frac{Z(\beta)}{Z(\beta')} e^{-(\beta'-\beta)S} \\ &= P_\beta(S) \frac{e^{-(\beta'-\beta)S}}{\sum_S P_\beta(S) e^{-(\beta'-\beta)S}}. && (2.21) \end{aligned}$$

Das heißt, die genaue Kenntnis von $P_\beta(S)$ für ein β ermöglicht die Extrapolation zu jedem beliebigen anderen β-Wert β'. Mit einer endlichen Monte Carlo Simulation wird man jedoch $P_\beta(S)$ nie ganz exakt messen können. Da $P_\beta(S)$ eine Gauss-Kurvenartige Struktur hat, wird man gerade die Schwänze der Verteilung nur mit großer Ungenauigkeit bestimmen können. Deshalb kann man Gleichung (2.21) nur in einer Umgebung des simulierten β-Wertes anwenden.
Programmtechnisch unterteilt man den Bereich der Wirkung in eine bestimmte Anzahl Bins und bestimmt $N_\beta(S)$, die Anzahl der Konfigurationen mit einer Wirkung zwischen S und $S + \Delta S$, Wobei ΔS die Binbreite ist. Mit $n_\beta = \sum_S N_\beta(S)$ gilt dann

$$\frac{N_\beta(S)}{n_\beta} \underset{n_\beta \to \infty}{\longrightarrow} \frac{1}{Z(\beta)} W(S) e^{-\beta S} \quad . \qquad (2.22)$$

Setzt man nun (2.22) in (2.21) ein, so erhält man

$$P_{\beta'} = \frac{N_\beta(S)e^{-(\beta'-\beta)S}}{\sum_S N_\beta(S)e^{-(\beta'-\beta)S}}. \tag{2.23}$$

Nun kann man den Erwartungswert jeder von S abhängigen Observablen berechnen:

$$\langle O\rangle_\beta = \sum_S O(S)P_\beta(S). \tag{2.24}$$

Will man den Erwartungwert einer Observablen berechnen, die keine direkte Funktion der Wirkung ist, wie beispielsweise die Magnetisierung, so muß man für Konfigurationen, die dasselbe S haben (im selben Bin liegen) den Erwartungswert der Observable bei festem S bilden:

$$\begin{aligned}
\langle M\rangle_\beta &= \frac{1}{Z(\beta)}\sum_\sigma M(\sigma)e^{-\beta H(\sigma)} \\
&= \frac{1}{Z(\beta)}\sum_\sigma\sum_S \delta(S-H(\sigma))\,M(\sigma)e^{-\beta H(\sigma)} \\
&= \frac{1}{Z(\beta)}\sum_S\sum_\sigma \delta(S-H(\sigma))\,M(\sigma)e^{-\beta H(\sigma)} \\
&= \sum_S\left(\sum_\sigma \frac{\delta(S-H(\sigma))\,M(\sigma)}{W(S)}\right)\frac{1}{Z(\beta)}W(S)e^{-\beta H(\sigma)} \\
&= \sum_S\left(\sum_{\substack{\sigma\ mit \\ H(\sigma)=S}} \frac{M(\sigma)}{W(S)}\right)P_\beta(S) \\
&= \sum_S \bar{M}_S P_\beta(S) && (2.25) \\
\text{mit}\quad \bar{M}_S &= \frac{1}{W(S)}\sum_{\substack{\sigma\ mit \\ H(\sigma)=S}} M(\sigma). && (2.26)
\end{aligned}$$

Die fundamentale Beobachtung der Multihistogramm-Methode besteht nun darin, daß man aus Simulationen bei verschiedenen β-Werten $(\beta_1, \beta_2, \ldots, \beta_R)$ jeweils die Zustandsdichte $W(S)$ schätzen kann. Aus Gleichung (2.22) folgt nämlich

$$W(S) = \frac{N_\beta(S)}{n_\beta}Z(\beta)e^{\beta S} = \frac{N_\beta(S)}{n_\beta}e^{f(\beta)+\beta S}, \tag{2.27}$$

wobei wir die freie Energie als $f(\beta) = +\ln Z(\beta)$ definiert haben. Man kann nun die Schätzungen für $W(S)$ bei den verschiedenen β-Werten mit beliebigen Wahrscheinlichkeiten $p_n(S)$ mit $\sum_{n=1}^R p_n(S) = 1$ multiplizieren und aufaddieren und erhält so eine weitere Schätzung für $W(S)$

$$W(S) = \sum_{l=1}^R p_l(S)\frac{N_{\beta_l}(S)}{n_{\beta_l}}e^{f(\beta_l)+\beta_l S}. \tag{2.28}$$

Die Freiheit in der Wahl der $p_n(S)$ kann man nun dazu benutzen, den statistischen Fehler auf $W(S)$ zu minimieren. Unter der Annahme, daß für die Fehler $\delta^2 N_{\beta_n} = g_n \bar{N}_{\beta_n}$ gilt, wobei $g_n = 2\tau_{int,n}$ ist, wird in [9] wird gezeigt, daß die aus dieser Forderung resultierende Wahl der $p_n(S)$ folgendermaßen aussieht:

$$p_n = \frac{g_n^{-1} n_{\beta_n} e^{-f(\beta_n)-\beta_n S}}{\sum_{l=1}^{R} g_l^{-1} n_{\beta_l} e^{-f(\beta_l)-\beta_l S}}. \tag{2.29}$$

Setzt man dies in Gleichung (2.28) ein, so erhält man

$$W(S) = \frac{\sum_{k=1}^{R} N_{\beta_k} g_k^{-1}}{\sum_{l=1}^{R} g_l^{-1} n_{\beta_l} e^{-f(\beta_l)-\beta_l S}}. \tag{2.30}$$

und für die Wahrscheinlichkeitsverteilung

$$P_\beta(S) = \frac{\sum_{k=1}^{R} N_{\beta_k} g_k^{-1} e^{-\beta S}}{\sum_{l=1}^{R} g_l^{-1} n_{\beta_l} e^{-f(\beta_l)-\beta_l S}}. \tag{2.31}$$

Die Zustandssumme bei einem der simulierten β_n muß natürlich die exponenzierte freie Energie ergeben, so daß man noch eine zusätzliche Gleichung erhält:

$$Z(\beta_n) = \sum_S P_{\beta_n}(S) = e^{f(\beta_n)}. \tag{2.32}$$

Die Iteration der letzten beiden Gleichungen ergibt dann selbstkonsistent die freien Energien, wobei man noch die Freiheit hat, eine der freien Energien auf Null zu setzen.

Kapitel 3

Numerische Resultate

Die Simulation des dreidimensionalen O(4)-symmetrischen Heisenbergmodells wurde auf Alpha-Worstations in Bielefeld durchgeführt. Um die Finite-Size-Scaling-Methode anwenden zu können, wurden Rechnungen auf Gittern der Grösse $8, 10, 12, 14, 16, 24, 32$ und 48 durchgeführt. Da nach [12] die kritische Kopplung $\beta_c \cong 0.9360$ beträgt, wurden bei allen Gittergrößen Konfigurationen bei diesem Wert der Kopplung erzeugt. Nach jedem zehnten Cluster-Update wurden innere Energie und der Betrag der Magnetisierung gemessen und abgespeichert. Um die Multihistogramm-Methode anwenden zu können, wurde darüber hinaus bei weiteren Kopplungswerten simuliert, die sich aus der Bedingung ergaben, daß sich die Energiehistogramme benachbarter Kopplungen überlappen. Dabei sollte die Überlappung so sein, daß die Höhe des einen Histogramms an der Stelle des Maximums des zweiten Histogramms immer noch ein Drittel der Peakhöhe des zweiten Histogramms betrug. Bei den Gittern der Größe $12, 16, 24, 32$ und 48 wurde für die Simulationen unmittelbar oberhalb und unterhalb von $\beta = 0.9360$ die Statistik so gewählt, daß alle drei Simulationen in Einheiten der Korrelationslänge die gleiche Statistik haben. Weiter unterhalb von $\beta = 0.9360$ wurden soviele Simulationen durchgeführt, daß die Kopplung, bei der die Suszeptibilität nach [12] maximal wird, symmetrisch von Simulationspunkten umgeben ist. Um Binders Methode zur Bestimmung der kritischen Temperatur anwenden zu können, wurden noch weitere Simulationen auf Gittern der Größe $8, 10$ und 14 durchgeführt. Die genauen Werte der Kopplung, die Anzahl der Messungen und die Gewichtsfaktoren g_n für die Ferrenberg-Swendsen-Interpolation sind in Tabelle A.1 aufgelistet.

Für die spätere Finite-Size-Scaling Analyse wurden aus innerer Energie und Magnetisierung folgende Observablen berechnet und mit Hilfe der Ferrenberg-Swendsen-Methode interpoliert: Innere Energie und spezifische Wärme, sowie Magnetisierung, deren Quadrat und Suszeptibilität, sowie Binderkumulante und deren Ableitung

nach der Kopplung. Die Ableitung der Binderkumulante wurde dabei auf zwei Arten bestimmt. Zum einen direkt als mehrfache Ableitung der Zustandssumme mithin als Summe von Erwartungswerten und indirekt durch eine kubische Spline-Interpolation der Resultate für die Binderkumulante. Darüber hinaus wurden pseudokritische Kopplungen bestimmt, die durch die Position des Maximums der Suszeptibilität charakterisiert sind.
Ein Problem bei der Analyse von korrelierten Daten ist die Schätzung der Fehler. Für unkorrelierte Daten ist die Varianz Δ des Mittelwertes

$$\bar{x} = \frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N} x_i$$

durch die Varianz σ der x_i wie folgt gegeben

$$\Delta = \frac{\sigma}{\sqrt{N}}.$$

Dabei ist

$$\rho = \frac{1}{N-1}\sum_{i=1}^{N}(x_i - \bar{x})^2$$

eine erwartungstreue Schätzung für σ.
Dies ist im Falle korrelierter Daten nicht mehr korrekt. In dieser Situation hat sich die sogenannte Jackknife-Methode bewährt, die im folgenden Abschnitt kurz erläutert werden soll.

3.1 Fehlerbestimmung und Jackknife-Methode

Man betrachte dazu einen Datensatz der Länge n auf dem eine Observable $\mathcal{O}$ und ihr Fehler geschätzt werden soll. Dabei sei T eine Schätzfunktion für $\mathcal{O}$. Man unterteilt nun den Datensatz in N Blöcke der Länge M mit $n = N \cdot M$. Dann wertet man die Schätzfunktion T auf allen Teildatensätzen aus, die durch Weglassen eines der N Blöcke entstehen. Die so entstandenen Schätzwerte $T_i, i = 1, \ldots, N$ kombiniert man mit der Schätzung T zu den sogenannten Pseudowerten des Jackknife:

$$J_i = N \cdot T - (N-1) \cdot T_i. \tag{3.1}$$

Wenn nun M groß ist gegen die Autokorrelationslänge der Observablen O, so erwartet man, daß die Pseudowerte des Jackknife statistisch unabhängig sind. Damit liefern

$$\bar{J} = \frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N} J_i \tag{3.2}$$

und

$$s^2(\bar{J}) = \sqrt{\frac{\sum_{i=1}^{N}(J_i - \bar{J})^2}{N(N-1)}} \tag{3.3}$$

eine bessere Schätzung für Mittelwert und Fehler der Observablen $\mathcal{O}$. Eine eventuelle Verzerrung der Schätzfunktion T wird durch dieses Vorgehen ebenfalls verringert, das heißt die Schätzung verbessert. Umgekehrt kann man aus dem Vergleich von T und $\bar{J}$ die Verzerrung abschätzen. Solange diese Verzerrung kleiner als der statistische Fehler $s^2(\bar{J})$ ist, ignoriert man sie in praktischen Anwendungen meist.
Bei der Wahl der Blocklänge muß also beachtet werden, daß sie größer als die Autokorrelation ist, weil man sonst den Fehler unterschätzt. Die Blocklänge darf jedoch auch nicht zu lang sein, da man sonst zuwenige J_i erhält und die Fehlerberechnung in Gleichung (3.3) sinnlos wird. Die Jackknife-Methode wird nun zusammen mit der Ferrenberg-Swendsen- Interpolation benutzt. Dazu macht man eine Ferrenberg-Swendsen-Interpolation für die geblockten Datensätze und wendet auf diese Ergebnisse den Jackknifealgorithmus an. Dadurch kann man auch für komplizierte Größen einen sinnvollen Fehler angeben. Bei der Untersuchung der Abhängigkeit der Fehlergröße von der Blocklänge für die verschiedenen Observablen auf einem Gitter der Ausdehnung $L = 48$, hat sich eine Einteilung in 20 Blöcke als sinnvoll erwiesen.

3.2 Die Bestimmung der kritischen Temperatur

Im Abschnitt (1.2) wurden drei Methoden vorgestellt, die kritische Temperatur zu bestimmen. Dabei sind Binders Methode und die χ^2-Methode am verläßlichsten, da sie in der bisher dargestellten Form keine explizite Information über kritische Exponenten benötigen. Die Bestimmung der kritischen Temperatur nach Gleichung (1.66) bedeutet jedoch einen Konsistenzcheck und soll deshalb ebenfalls Verwendung finden. Für die Auswertung wurden die Observablen aus den Daten mit der Ferrenberg-Swendsen-Methode für β-Werte im Abstand $\Delta\beta = 2.5 \cdot 10^{-5}$ interpoliert.

3.2.1 Bestimmung der kritischen Temperatur nach Binder

Untersucht man die Abhängigkeit des Schnittpunktes zweier Binderkumulanten zu Gittergrößen l und $l' = bl$, so erhält man:

$$\beta_c(l, b) = \beta_c^{\infty}\left(1 + \frac{c_3}{c_1}\epsilon\right), \tag{3.4}$$

wobei

$$\epsilon = l^{y_1 - 1/\nu}\frac{1 - b^{y_1}}{b^{1/\nu} - 1}. \tag{3.5}$$

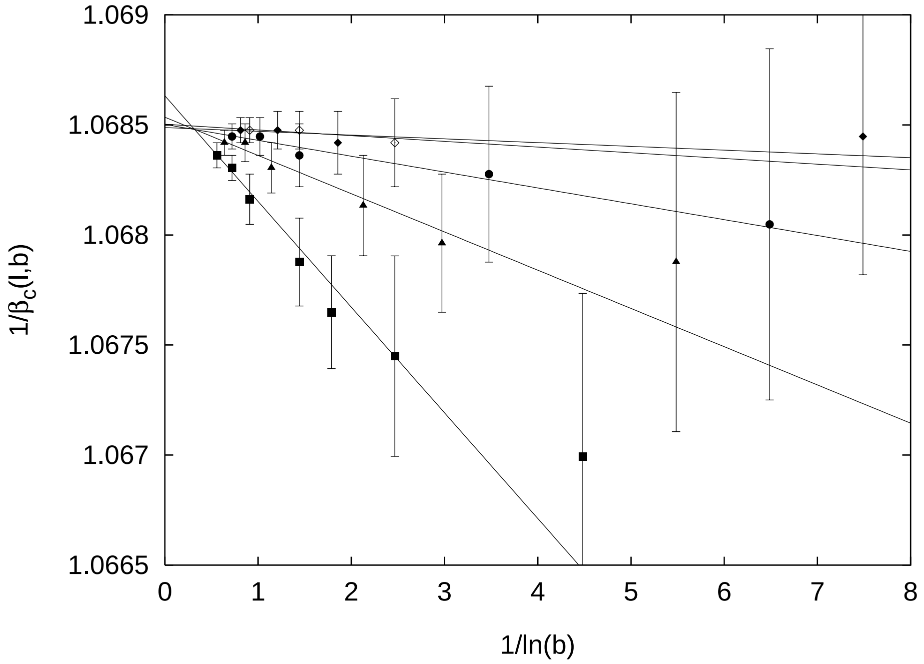

Abbildung 3.1: Schnittpunkte der Binderkumulanten $1/\beta_c(l,b)$ als Funktion von $1/\ln(b)$ für $l = 8$ (Vierecke),$l = 10$ (Dreiecke), $l = 12$ (Kreise), $l = 14$ (gefüllte Raute) und $l = 16$ (offene Raute)

Die Notation ist die von Abschnitt (1.2) insbesondere von Gleichung (1.70). In einer groben Approximation kann man nun ϵ durch $1/\ln b$ nähern und erhält Binders Resultat, welches keine Kenntnis von ν mehr erfordert. Die Ergebnisse für $\beta_c(l,b)$ für verschiedene l und b wurden nach Gleichung (1.69) gefittet und sind in Abbildung (3.1) graphisch dargestellt. Die Extrapolation der Geraden nach $1/\ln(b) = 0$ liefert innerhalb der Fehler für die Fitparameter einen konsistenten Wert für die kritische Kopplung. Nur die Gerade für $l = 8$ zeigt eine auffallende Abweichung, so daß es vernünftig scheint, einen Konstantenfit für $\beta_c(l, b = \infty)$ ohne den Wert für $l = 8$ zu machen. Das Ergebnis lautet:

$$\begin{aligned} \frac{1}{\beta_c} &= 1.06850(5) \\ \beta_c &= 0.93589(5). \end{aligned} \tag{3.6}$$

Es wurde darüber hinaus versucht, die Daten für die Schnittpunkte der Binderkumulanten nach Gleichung (3.4) zu fitten. Dabei stellte sich heraus, daß die Daten nicht für den daraus resultierenden 4-Parameter-Fit ausreichen. Deshalb wurde für den Parameter $1/\nu$ der in [12] angegebenen Wert von 1.337 gewählt und der verbleibende 3-Parameterfit durchgeführt. Der Vergleich mit dem einfachen Fit ergab jedoch, daß die Ergebnisse innerhalb der Fehlerbalken übereinstimmten. Die extrapolierten kritischen Kopplungen liegen für die verschiedenen Gittergrößen l näher beieinander und es ergibt sich wieder ein Abweichung für $l = 8$. Als Vergleich geben wir noch das Ergebnis für den zweiten Fit, ebenfalls ohne $l = 8$, an:

$$\begin{aligned} \frac{1}{\beta_c} &= 1.06848(6) \\ \beta_c &= 0.93591(5). \end{aligned} \tag{3.7}$$

3.2.2 Bestimmung der kritischen Temperatur nach der χ^2-Methode

Zunächst wurde die Methode auf den gesammten Satz verfügbarer Gittergrößen angewendet. Die so erhaltene kritische Kopplung lag jedoch höher als das Ergebnis aus der Binder-Methode. Beim sukzessiven Weglassen der kleinen Gittergrößen von $l = 8$ bis $l = 14$ beobachtete man, daß die $\chi^2_{min}/d.o.f.$-Kurve zunächst bis hinunter zu $\beta = 0.9359$ wandert, wobei $\chi^2_{min}/d.o.f.$ kleiner wird, um dann bei nur noch 5 bzw. 4 Gittern im Fit bei steigendem $\chi^2_{min}/d.o.f.$ wieder zu größeren β-Werten zu wandern. Dies bestätigt die Vermutung, daß man sich für $l = 8$ noch nicht im Finite-Size-Scaling-Bereich befindet. Für die weiteren Untersuchungen wurden daher die mit hoher Statistik gerechneten Gitter der Größe $l = 12, 16, 24, 32, 48$ benutzt. Es wurde nun versucht die verschiedenen Observablen nicht nur nach dem führenden Verhalten zu fitten, sondern noch den Einfluß des größten irrelevanten Exponenten nach Gleichung (1.71) mit einzubeziehen. Es ergibt sich dabei ein 4-Parameter-Fit, der bei 5 Datensätzen wenig Sinn macht. Deshalb wurde versucht, die Größe des irrelevanten Exponenten $y_1 = -\omega$ abzuschätzen, um dann einen 3-Parameter-Fit zu machen. Dazu wurde die χ^2-Methode auf die Binderkumulante angewendet. Da die Binderkumulante selbst eine Skalenfunktion ist, lautet das führende l-Verhalten nach Gleichung (1.71) mit $\rho = 0$:

$$U_l = c_0 + c_3\, l^{-\omega}. \tag{3.8}$$

Die Kopplung mit minimalem $\chi^2/d.o.f.$ wurde dabei für verschiedene feste ω bestimmt. Es stellte sich heraus, das die Position des Minimums relativ unempfindlich gegenüber der Wahl von ω war. Die Kurve, die man erhält, wenn man das $\chi^2/d.o.f.$ des Fits über der Kopplung aufträgt, wurde jedoch umso schmaler, je größer w gewählt wurde. Die getesteten Werte für ω lagen zwischen 0.1 und 10. Ein ω viel größer als 1 macht jedoch wenig Sinn. Es bedeutet ja gerade, daß man keine Korrekturen zum führenden Verhalten hat. Für $\omega = 1, 2, 3$ liegt das Minimum genau bei $\beta = 0.9359$. Fittet man die Binderkumulante nach Gleichung (3.8) mit $\omega = 0$, so erhält man als Minimum $\beta = 0.935925$. Obwohl die Bestimmung von ω nicht so gut funktioniert, wie beispielsweise in [14], wurde trotzdem versucht die Magnetisierung $\langle |m| \rangle$ und die Suszeptibilität χ mit $\omega = 1, 2, 3$ nach Gleichung (1.71) zu fitten. Dabei ergibt sich tatsächlich eine Verringerung von $\chi^2_{min}/d.o.f.$, aber keine Verschiebung

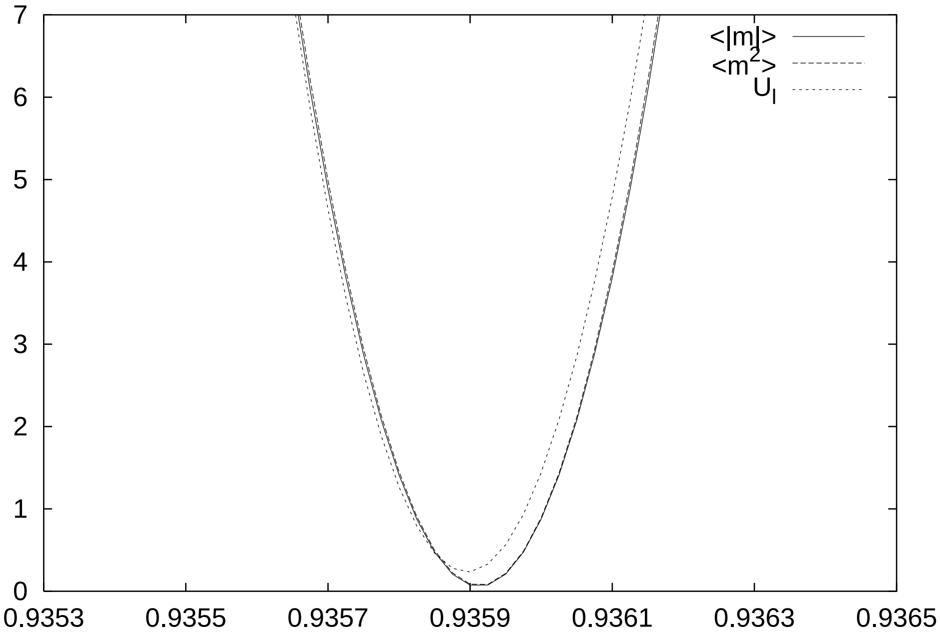

Abbildung 3.2: $\chi^2_{min}/d.o.f.$ für Magnetisierung, Suszeptibilität und Binderkumulante

der Position der Minima. Allerdings fächern die $\chi^2_{min}/d.o.f.$-Kurven auf, was darauf hindeutet, daß der Fit nicht mehr so zuverlässig ist. Für die weitere Auswertung wurde daher für diese beiden Observablen die einfache χ^2-Methode mit Fit nach dem führenden l-Verhalten verwendet. Das Minimum liegt für die Magnetisierung bei $\beta = 0.9359$ und für die Suszeptibilität bei $\beta = 0.935925$. Dies gibt mindestens einen Hinweis, wie groß der Fehler ist. Das Ergebnis stimmt innerhalb der Fehler mit dem aus der Binder-Methode überein, so daß sich die kritische Kopplung zu

$$\beta_c = 0.93590(5) \tag{3.9}$$

ergibt. Abbildung (3.2) enthält die $\chi^2_{min}/d.o.f.$-Kurven für $\langle|m|\rangle$, χ und U_l, wobei U_l nach Gleichung (3.8) mit $\omega = 1$ gefittet wurde.

3.3 Die Bestimmung der kritischen Exponenten

Durch Anwendung der χ^2-Methode hat man nicht nur Zugang zu den kritischen Exponenten an der kritischen Kopplung, sondern kann auch den Einfluß des Fehlers der kritischen Kopplung auf den Fit untersuchen. Dabei sollten die Ergebnisse für die kritischen Exponenten innerhalb des Fehlerbandes der kritischen Kopplung nur innerhalb des Fehlers für die kritischen Exponenten bei der kritischen Kopplung variieren. Zunächst wurde aus der Ableitung der Binderkumulante nach der Kopplung der Exponent $1/\nu$ bestimmt. Anschließend wurde aus Magnetisierung und Suszeptibilität β/ν bzw. γ/ν bestimmt und daraus mit dem ermittelten Wert für ν die Exponenten β und γ.

3.3.1 Der kritische Exponent $1/\nu$

Da die Binderkumulante eine Skalenfunktion ist, gilt für ihre Ableitung nach der Temperatur nach Gleichung (1.63)

$$\left.\frac{dU_l}{d\beta}\right|_{\beta=\beta_c} \propto l^{1/\nu}. \tag{3.10}$$

Man kann diese Ableitung auf zwei verschiedene Weisen bestimmen. Zum einen handelt es sich um eine mehrfache Ableitung der freien Energiedichte, die man durch verschiedene Erwartungswerte ausdrücken kann:

$$\frac{dU_l}{d\beta} = (1-U_l)\left\{\langle S\rangle - 2\frac{\langle m^2 S\rangle}{\langle m^2\rangle} + \frac{\langle m^4 S\rangle}{\langle m^4\rangle}\right\}. \tag{3.11}$$

Dieser Ausdruck wurde nun mit Hilfe der Ferrenberg-Swendsen-Methode interpoliert und die Fehler mittels Jackknife bestimmt.

Andererseits kann man die Ableitung auch aus einer Interpolation mit kubischem Spline schätzten. Die Fehleranalyse wurde auch hier mit der Jackknife-Methode durchgeführt, indem die Binderkumulante auf den geblockten Datensätzten interpoliert wurde, darauf eine Spline-Interpolation angewand wurde und auf diese Ergebnisse wiederum der Jackknife-Algorithmus. Dabei stellte sich heraus, daß die Ergebnisse für die Ableitung der Binderkumulanten aus beiden Methoden auf das genaueste übereinstimmten. Aus dem Geraden-Fit ergibt sich:

$$\frac{1}{\nu}(\beta_c = 0.93590(5)) = 1.3231(64)(54) \tag{3.12}$$

Die erste Klammer gibt den statistischen Fehler an, während die zweite Klammer den systematischen Fehler aufgrund der Unsicherheit in der Bestimmung von β_c angibt. Der Effekt des Fehlers für β_c ist also von der gleichen Größe wie der statistische Fehler, so daß sich als Ergebnis für den kritischen Exponenten ν ergibt:

$$\frac{1}{\nu} = 1.323(12) \tag{3.13}$$

$$\nu = 0.7558(33) \tag{3.14}$$

In Abbildung (3.3) ist das Skalenverhalten der Ableitung der Binderkumulante als Funktion der Gittergröße gezeigt.

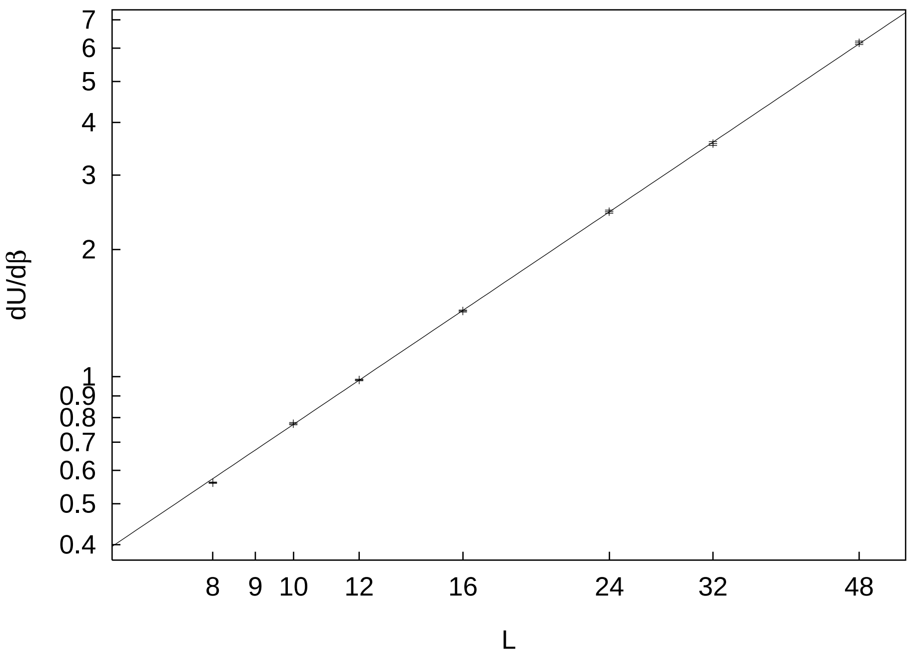

Abbildung 3.3: Skalenverhalten der Ableitung der Binderkumulante als Funktion der Gittergröße, die Fehler sind kleiner als die Größe der Symbole

3.3.2 Der kritische Exponent β

Nach Gleichung (1.63) gilt für die Magnetisierung am kritischen Punkt

$$\langle |m| \rangle \propto l^{-\beta/\nu}. \tag{3.15}$$

Auch in diesem Fall wurde der Einfluß des Fehlers der kritischen Kopplung auf den Wert von β/ν untersucht[1]:

$$\frac{\beta}{\nu}(\beta_c = 0.93590(5)) = 0.5146(5)(17). \tag{3.16}$$

Es stellt sich heraus, daß dieser Effekt größer ist als der statistische Fehler. Als Ergebnis erhalten wir:

$$\frac{\beta}{\nu} = 0.5146(22). \tag{3.17}$$

Mit der oben gemachten Schätzung für ν erhält man hieraus

$$\beta = 0.3889(24) \tag{3.18}$$

Der Fehler wurde durch einfache Fehlerfortpflanzung bestimmt. In Abbildung (3.4) ist das Skalenverhalten der Magnetisierung als Funktion der Gittergröße gezeigt.

[1] Man beachte, daß β_c die kritische Kopplung und β den kritischen Exponenten bezeichnet.

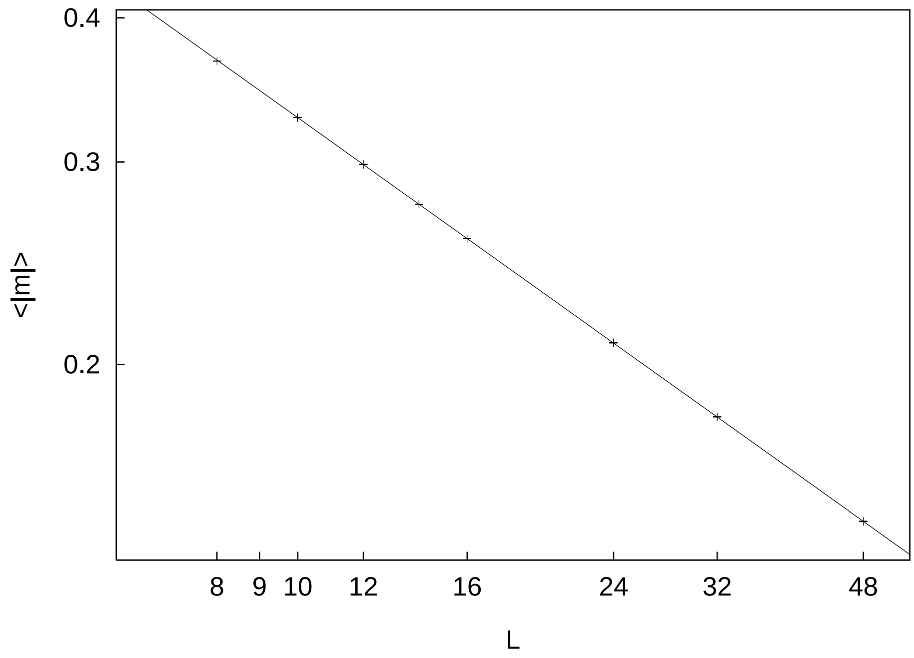

Abbildung 3.4: Skalenverhalten der Magnetisierung als Funktion derGittergröße, die Fehler sind kleiner als die Größe der Symbole

3.3.3 Der kritische Exponent γ

Die Suszeptibilität χ ist folgendermaßen durch Erwartungswerte gegeben:

$$\chi = V\left(\langle m^2\rangle - \langle m\rangle^2\right), \tag{3.19}$$

wobei $V = l^3$ das Volumen des Systems ist, und

$$m = \frac{1}{V}\sum_x M(x) \tag{3.20}$$

das Gittermittel der lokalen Magnetisierung ist. Wegen der O(4)-Symmetrie ist auf einem endlichen Gitter der Erwartungswert $\langle M\rangle$ immer identisch Null. Die Suszeptibilität reduziert sich daher auf einem endlichen Gitter zu:

$$\chi_v = V\langle m^2\rangle. \tag{3.21}$$

Diese Größe stimmt allerdings unterhalb der kritischen Kopplung mit der wahren Suszeptibilität überein. Daher erwartet man für χ_v in der Umgebung der kritischen Kopplung dasselbe Finite-Size-Scaling-Verhalten wie für die wahre Suszeptibilität nach Gleichung (1.63):

$$\chi_v \propto l^{\gamma/\nu} \tag{3.22}$$

b

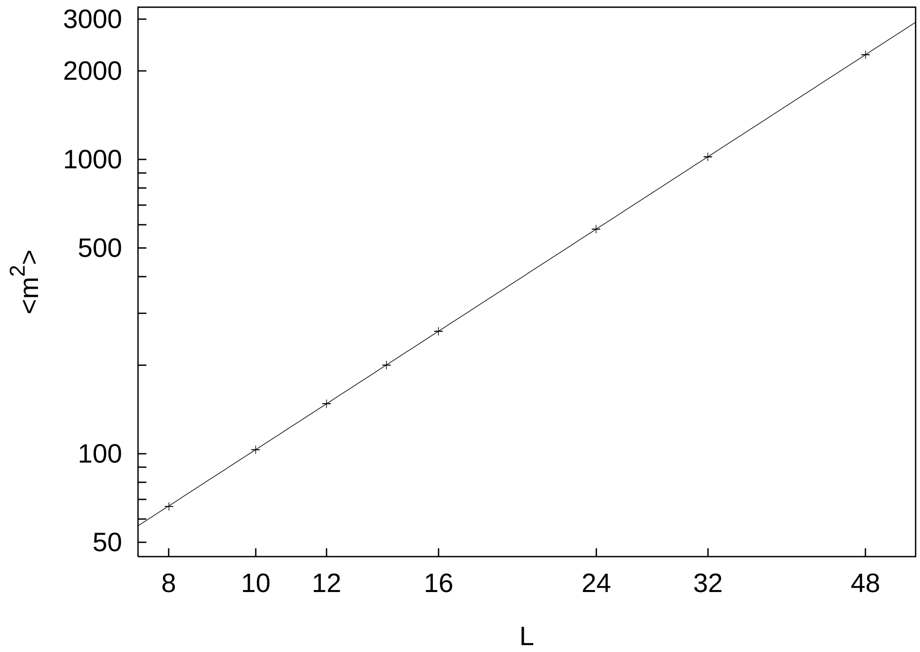

Abbildung 3.5: Skalenverhalten von χ^v als Funktion der Gittergröße, die Fehler sind kleiner als die Größe der Symbole

Daraus ergaben sich für γ/ν folgende Werte:

$$\frac{\gamma}{\nu}(\beta_c = 0.93590(5)) = 1.9708(9)(32) \tag{3.23}$$

Auch in diesem Fall hängt das Ergebnis für den kritischen Exponenten empfindlich von der Wahl der kritischen Kopplung ab. Die Variation durch die Wahl der kritischen Kopplung ist größer als der statistische Fehler. Daher erhält man als Ergebnis:

$$\frac{\gamma}{\nu} = 1.9708(41). \tag{3.24}$$

Aus der Schätzung für ν ergibt sich nun

$$\gamma = 1.4895(72). \tag{3.25}$$

In Abbildung (3.5) ist das Skalenverhalten von χ_v als Funktion der Gittergröße gezeigt.

Ein weiterer Test der Ergebnisse ergibt sich aus der Anwendung der Skalenrelationen aus Gleichungen (1.53) und (1.55):

$$2\frac{\beta}{\nu} + \frac{\gamma}{\nu} = d. \tag{3.26}$$

Setzt man die Resultate ein, so erhält man für die linke Seite:

$$2\frac{\beta}{\nu} + \frac{\gamma}{\nu} = 3.0000(85). \tag{3.27}$$

3.4 Das Skalenverhalten von χ_{max} und $\beta_{\chi_{max}}$

In diesem Abschnitt soll das Finite-Size-Scaling-Verhalten der Peakhöhe $\chi^c_{max}(l)$ der zusammenhängenden Suszeptibilität und der pseudokritischen Kopplung $\beta_{\chi^c_{max}}(l)$ untersucht werden. Im Abschnitt über Finite-Size-Scaling war gezeigt worden, daß man für die Peakhöhe der Suszeptibilität folgendes Verhalten erwartet:

$$\chi^c_{max} \propto l^{\gamma/\nu}. \tag{3.28}$$

Da man die wahre Suszepitbilität, wie bereits erwähnt, nicht auf einem endlichen Gitter messen kann, behilft man sich mit einer alternativen Definition für die zusammenhängenden Suszeptibilität:

$$\chi^c = V\left(\langle m^2\rangle - \langle |m|\rangle^2\right). \tag{3.29}$$

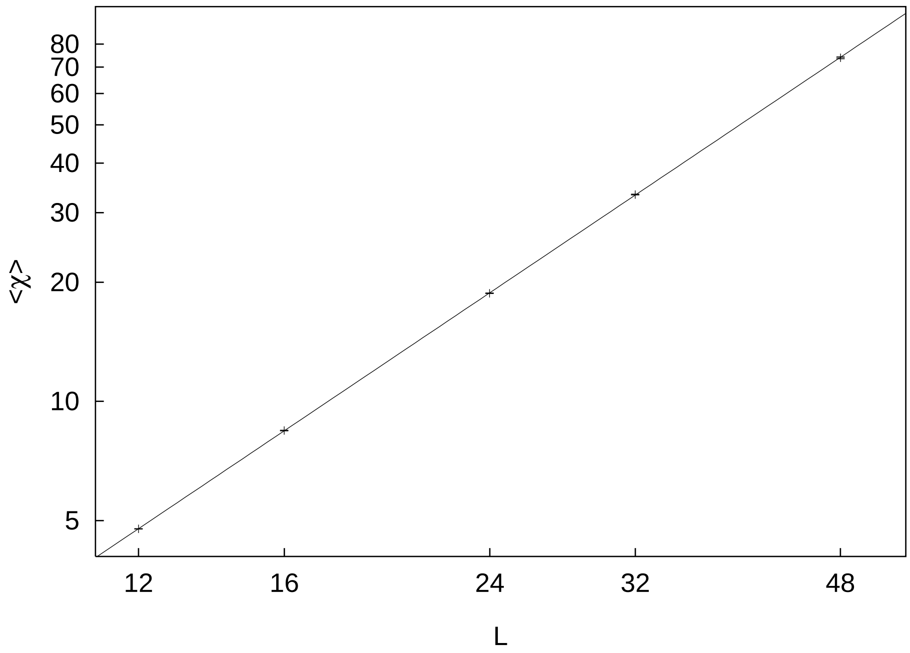

Abbildung 3.6: Skalenverhalten von χ^c_{max} als Funktion der Gittergröße, die Fehler sind kleiner als die Größe der Symbole

Der Erwartungswert des Betrages der Magnetisierung $\langle |M| \rangle$ weicht auf einem endlichen Gitter aufgrund von Oberflächeneffekten vom Erwartungswert der Magnetisierung auf einem unendlichen Gitter ab. Oberhalb der kritischen Kopplung erwartet man daher, daß obige Definition der Suszeptibilität im thermodynamischen Limes mit der wahren Suszeptibilität übereinstimmt.

Peakhöhe und Position des Peaks wurden auch hier durch Ferrenberg-Swendsen-Interpolation auf geblockten Datensätzen bestimmt, um anschließend mit der Jackknife-Methode eine Schätzung für den Fehler zu ermitteln. Als Resultat eines Fits nach dem Verhalten aus Gleichung (3.28) ergibt sich:

$$\frac{\gamma}{\nu} = 1.979(2). \tag{3.30}$$

Dieser Wert ist größer, als der aus dem Skalenverhalten von χ_v. Ein Weglassen der kleinen Gittergrößen, für welche der Peak außerhalb der Skalenregion liegen könnte, bringt keine signifikante Veränderung hin zum in Gleichung (3.24) angegebenen Wert für γ/ν. Allerdings erfüllt dieser Wert die Skalenrelation in Gleichung (3.26) besser, als der hier bestimmte Wert. Zwei Gründe sind für die beobachtete Abweichung, die auch in [12] und [13] berichtet wird, anzugeben. Zum einen kann es aufgrund oben erwähnter Oberflächeneffekte zu Abweichungen kommen, zum anderen beschreibt Gleichung (3.28) nur das führende Verhalten, so daß der Einfluß irrelevanter Skalenfelder und des regulären Teils der freien Energie unberücksichtigt bleiben. Eine

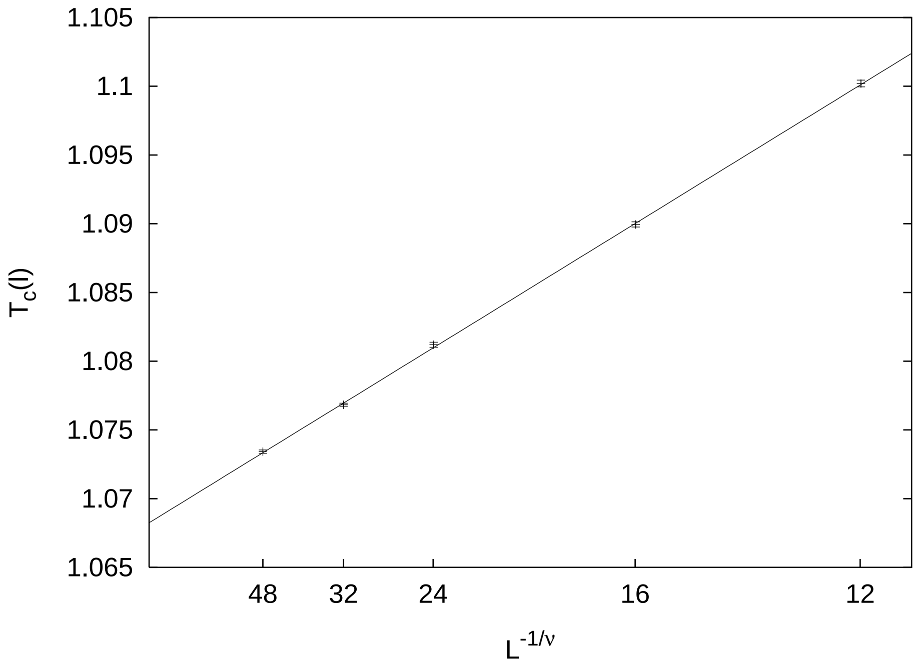

Abbildung 3.7: Skalenverhalten der pseudokritischen Temperatur als Funktion von $L^{-1/\nu}$

Bestimmung von γ/ν aus zwei verschiedenen Observablen kann daher zu voneinander abweichenden Resultaten führen. In Abbildung (3.6) ist das Skalenverhalten von χ^c_{max} als Funktion der Gittergröße gezeigt.
Nach Gleichung (1.66) gilt für die Position $\beta_{\chi^c_{max}}$ des Maximums der zusammenhängenden Suszeptibilität:

$$\frac{1}{\beta_{\chi^c_{max}}} - \frac{1}{\beta_c} \propto l^{-1/\nu}. \tag{3.31}$$

Das Resultat für einen Fit mit $1/\nu = 1.3231$ ist dann:

$$\frac{1}{\beta_c} = 1.0682(1) \longrightarrow \beta_c = 0.9361(1) \tag{3.32}$$

Dies liegt höher als das bisherige Ergebnis für die kritische Kopplung. In Abbildung (3.7) ist das Skalenverhalten von $T_c(l) = 1/\beta_{\chi^c_{max}}$ als Funktion von $l^{-1/\nu}$ gezeigt. Man kann Gleichung (3.31) noch umformen und erhält:

$$\beta_{\chi^c_{max}} = \beta_c + \frac{c}{l^{1/\nu}}. \tag{3.33}$$

Fittet man die Daten nach dem führenden Verhalten, so erhält man für β_c den Wert

$$\beta_c = 0.9360(1). \tag{3.34}$$

Dieser Wert stimmt nun innerhalb der Fehler mit dem bisherigen Resultat für die kritische Kopplung überein. Da die Qualität der Fits zur Bestimmung der kritischen Temperatur nach den weiter oben dargestellten Methoden besser ist, als für die an dieser Stelle angewandte Methode, lautet die kritische Kopplung

$$\beta_c = 0.93590(5). \tag{3.35}$$

Aus diesen Resultaten ergeben sich die verbleibenden kritischen Exponenten δ und α aus den Skalenrelationen Gleichungen (1.53) bis (1.56). Die Ergebnisse sind in

	$4-\epsilon$	Kanaya et al.	Diese Studie
$\gamma/\nu = 2-\eta$	1.97(1)	1.9746(38)	1.9708(41)
β/ν	0.515(5)	0.5129(11)	0.5146(22)
ν	0.73(2)	0.7479(90)	0.7558(33)
γ	1.44(4)	1.477(18)	1.4895(72)
β	0.38(1)	0.3836(46)	0.3889(24)
δ	4.82(5)	4.851(22)	4.830(25)
$\alpha = 2-d\nu$	-0.19(6)	-0.244(27)	-0.267(11)

Tabelle 3.1: Kritische Exponenten des dreidimensionalen O(4)-symmetrischen Heisenberg Modells

Tabelle 3.1 zusammen mit den Ergebnissen der ebenfalls numerischen Studie [12] und der $4-\epsilon$ Entwicklung [15] dargestellt. In [15] werden die Exponenten ν und η unabhängig bestimmt und die restlichen Exponenten aus den Skalenrelationen (1.53) bis (1.53) bestimmt.

3.5 Vergleich mit 2-flavour-QCD

In diesem Abschnitt sollen Ergebnisse der Bestimmung der kritischen Exponenten für QCD mit zwei masselosen Quarks diskutiert werden. Zunächst sollen jedoch die verschiedenen Möglichkeiten aufgezählt werden, die dazu führen können, daß man in Gittersimulationen nicht die kritischen Exponenten des dreidimensionalen O(4)-Heisenberg Modells findet. Wie bereits in Kapitel (1.1) erwähnt, gibt es die Möglichkeit, daß sich die physikalischen Parameter der QCD mit zwei masselosen Quarks in einem Parameterbereich befinden, der nicht zum Infrarotfixpunkt renormiert würde. In diesem Fall wäre der Phasenübergang erster Ordnung. Eine weitere Möglichkeit ist, daß das strange-Quark zu leicht ist, so daß die Thermodynamik der QCD von einer 3-flavour-Theorie beschrieben wird. Für mehr als zwei Flavour erwartet man jedoch einen Phasenübergang erster Ordnung. Die nächste Möglichkeit für das Abweichen der kritischen Exponenten von den O(4)-Werten besteht darin, daß die sogenannte Ginzburg-Region zu klein ist, um das wahre kritische Verhalten zu sehen. Die Ginzburg-Region ist definiert durch $t \equiv \frac{T-T_c}{T_c} < t_G$. Außerhalb der Ginzburg-Region ($t > t_G$)wird das Verhalten der Theorie durch Mean-Field-Theorie beschrieben. Nur innerhalb der Ginzburg-Region findet man das tatsächliche kritische Verhalten. Der Wert von t_G ist dabei wie T_c nicht universell. Um zu entscheiden, ob man sich innerhalb der Ginzburg-Region befindet, muß man daher die kritischen Exponenten mit einer Genauigkeit bestimmen, die es erlaubt, sie von den Mean-Field-Resultaten $\eta = 0$ und $\nu = 1/2$ zu unterscheiden. Kocic und Kogut finden in [16] für das 3-dimensionale Gross-Neveu-Modell Mean-Field-Exponenten und nicht die (nach dimensionaler Reduzierung) erwarteten Exponenten des 2-dimensionalen Ising-Modells. Dies kann als ein Hinweis darauf gedeutet werden, daß t_G für dieses Modell sehr klein ist. Eine weitere und bei ihrer Bestätigung überaschende Möglichkeit wäre, daß es einen zweiten Infrarotfixpunkt gibt zu dem QCD renormiert würde. Der Phasenübergang wäre dann zwar zweiter Ordnung, aber hätte nicht mehr O(4)-Exponenten.
Karsch und Laermann haben in [17] unter anderem die oben beschriebenen Finite-Mass-Scaling-Methoden angewendet, um kritische Exponenten zu bestimmen. Die Simulationen wurden auf einem $8^3 \times 4$ Gitter für Quarkmassen $m_q = 0.075, 0.0375$ und 0.02 durchgeführt. Die beiden äußeren Parameter, die reduzierte Temperatur t und das symmetriebrechende Feld h, sind folgendermaßen durch die Parameter der

	$N_\sigma = 8$	$N_\sigma = 12$
m_q	$6/g^2$	$6/g^2$
0.0200	5.282(2)	
0.0375	5.306(2)	5.306(2)
0.0750	5.350(4)	5.346(4)
0.1500		5.403(5)

Tabelle 3.2: Pseudokritische Kopplungen für $N_\sigma = 8$ und 12.

gitterregularisierten Theorie gegeben:

$$t = \frac{6}{g^2} - \frac{6}{g_c^2(0)} \tag{3.36}$$

$$h = m_q \cdot N_\tau . \tag{3.37}$$

Dabei bezeichnet $g_c^2(0)$ die kritische Kopplung auf einem Gitter mit zeitlicher Ausdehnung N_τ bei verschwindender Quarkmasse. Bei nichtverschwindender Quarkmasse definiert man pseudo-kritische Kopplungen $g_c^2(m_q)$ über die Position des Peaks verschiedener Response-Funktionen, beispielsweise der spezifischen Wärme. Es stellt sich dabei heraus, daß sich die pseudokritischen Kopplungen, die sich aus den verschiedenen Observablen ergeben, nicht voneinander unterscheiden. Wenn das äußere Feld h die Skala setzt und nicht die endliche Gittergröße in räumlicher Richtung, so sollte die Position von $g_c^2(m_q)$ auch nicht von N_σ abhängen. Die Analyse von Daten einer Simulation auf Gittern mit räumlicher Ausdehnung $N_\sigma = 12$ bestätigen dies. In Tabelle 3.2 sind die pseudokritischen Kopplungen für $N_\sigma = 8$ und 12 gezeigt. Sie wurden aus den Peakposition der Polyakovloop-Suszeptibilität und der vollen chiralen Suszeptibilität gewonnen. Wie im Fall $N_\sigma = 8$ zeigte sich keine Abhängigkeit von der zur Bestimmung verwendeten Observable. Die Daten für die pseudokritischen Kopplungen wurden für $N_\sigma = 8, 12$ zusammen mit weiteren Daten aus [18] nach Gleichung (1.74) mit dem Ansatz

$$\frac{6}{g_c^2(m_q)} = \frac{6}{g_c^2(0)} + c\, m_q^{1/\beta\delta} \tag{3.38}$$

gefittet. Fittet man die drei Parameter $6/g_c^2(0)$, c und $1/\beta\delta$, erhält man $1/\beta\delta = 0.60(6)$ und $6/g_c^2(0) = 5.230(9)$. Dies ist für $1/\beta\delta$ ein etwas höherer Wert als der O(4)-Wert $1/\beta\delta = 0.55(2)$ und verträglich mit dem Mean-Field-Wert $1/\beta\delta = 2/3$. Ein 2-Parameter-Fit mit $1/\beta\delta$ gleich dem O(4)-Wert, liefert jedoch einen ebensoguten Fit, wobei sich $6/g_c^2(0) = 5.222(2)$ ergibt. Ein Fit mit dem Mean-Field-Wert $1/\beta\delta = 2/3$ ergibt $6/g_c^2(0) = 5.237(7)$. Diese Resultate sind demnach noch nicht dazu geeignet, zwischen Mean-Field-Werten und O(4)-Werten zu unterscheiden.
Als weiteren Test kann man das Skalenverhalten des Peaks verschiedener Responsefunktionen nach Gleichung (1.74)und (1.75) untersuchen. Zur Zeit sind jedoch

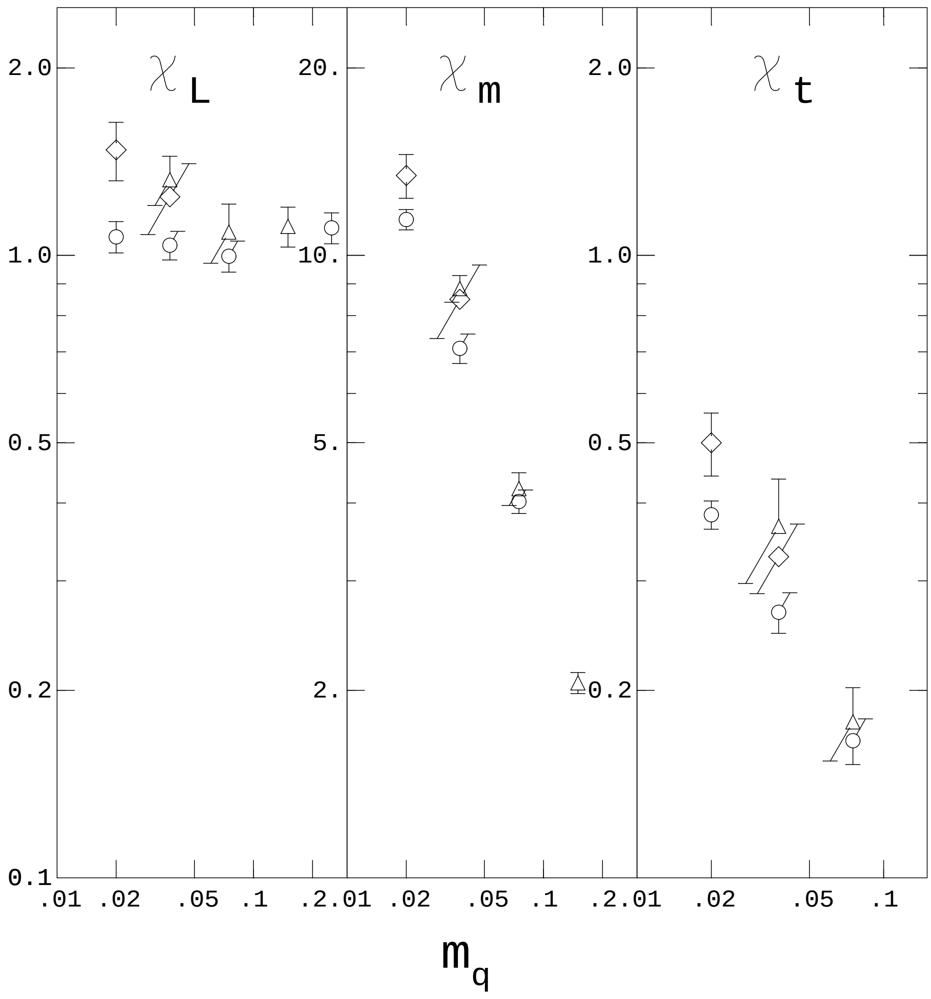

Abbildung 3.8: Peakhöhen der Polyakovloop-Suszeptibilität χ_L, der chiralen Suszeptibilität χ_m und einem Beitrag zur thermalen Suszeptibilität χ_t als Funktion der Quarkmasse für $N_\sigma = 8$ (Kreise),$N_\sigma = 12$ (Dreiecke),$N_\sigma = 16$ (Rauten)

die Volumeneffekte dieser Größen noch nicht unter Kontrolle. Man erwartet, daß die Peakhöhen bei fester Quarkmasse monoton vom räumlichen Volumen abhängen. Ein Blick auf Abbildung (3.8) zeigt, daß dies noch nicht der Fall ist. Daher wäre es verfrüht, aus diesen Daten kritische Exponenten zu extrahieren.

Ein weiterer Test besteht darin, das Skalenverhalten des chiralen Kondensats an den pseudokritischen Kopplungen zu untersuchen. Aus der Skalenhypothese ergibt sich folgendes Verhalten:

$$\langle\bar{\psi}\psi\rangle\Big|_{6/g_c(m_q)} = c_\psi m_q^{1/\delta}. \tag{3.39}$$

Fittet man die Daten für $N_\sigma = 12$ nach diesem Verhalten, erhält für $1/\delta$ den Wert

$$\frac{1}{\delta} = 0.348(12) \tag{3.40}$$

Dieses Ergebnis ist verträglich mit dem Mean-Field-Wert $1/\delta = 1/3$.
Bei der Finite-Size-Scaling-Analyse hatte sich die Verwendung der Binderkumulante, die selbst eine Skalenfunktion ist, als sehr nützlich erwiesen. Man kann diesen Erfolg im Fall der Finite-Mass-Scaling-Analyse wiederholen. Dazu betrachtet man folgenden Quotienten aus zweiter und erster Ableitung der freien Energie nach der Quarkmasse

$$\Delta(t,h) = \frac{h \cdot \chi_m}{\langle \bar{\psi}\psi \rangle}. \tag{3.41}$$

Aus der Tatsache, daß $\Delta(t,h)$ eine Skalenfunktion ist, ergibt sich, daß ihr Wert bei $t = 0$ bis auf Korrekturen durch den regulären Anteil der freien Energie universell ist. Aus der Konstruktion ergibt sich dann:

$$\lim_{h \to 0} \Delta(t,h) = \begin{cases} 1, & \text{falls} \quad t > 0 \\ 1/\delta, & \text{falls} \quad t = 0 \\ 0, & \text{falls} \quad t < 0 \end{cases} \tag{3.42}$$

Die Kurven für Δ als Funktion von $6/g^2$ für verschiedene Quarkmassen, schneiden sich demnach bei $6/g_c^2$ und Δ hat an dieser Stelle den Wert $1/\delta$. Die bisherigen Ergebnisse aus dem Schnittpunkt der Kumulante für die beiden Quarkmassen $m_q = 0.0375$ und 0.02 ergeben

$$0.21 < \frac{1}{\delta} = 0.23 < 0.26. \tag{3.43}$$

Dies ist in Übereinstimmung mit dem O(4)-Wert $1/\delta = 0.208(2)$ und weicht signifikant von dem Mean-Field-Wert $1/\delta = 1/3$ ab. Um dieses Ergebnis noch weiter zu untermauern, bedarf es jedoch weiterer Simulationen bei kleineren Quarkmassen, um den Effekt des regulären Anteils der freien Energie kontrollieren zu können.
Nach diesen ermutigenden Resultaten sollen jedoch einige Dinge angesprochen werden, die man bei der Bestätigung der Hypothese, daß 2-flavour-QCD in derselben Universalitätsklasse liegt wie der O(4)-Magnet, im Auge behalten sollte. Ein Aspekt betrifft die verwendeten Quarkmassen. Da eine endliche Quarkmasse m_q wie oben beschrieben einer Korrelationslänge $\xi \propto m_q^{-\nu/(\beta+\gamma)}$ entspricht und ein Phasenübergang zweiter Ordnung durch divergierende Korrelationslänge charakterisiert ist, wäre es wünschenswert, möglichst kleine Quarkmassen zu simulieren. Große Korrelationslängen bedeuten jedoch numerisches slowing down, der Rechenaufwand verhält sich wie eine negative Potenz der Quarkmasse, so daß für kleine Quarkmassen die Simulationen immer aufwendiger werden. Ein weiteres Problem kommt dadurch zustande, daß jede Gitterregularisierung von Fermionen, die das sogenannte Species-Doubling vermeidet, die volle chirale Symmetrie erst wieder im Kontinuumslimes besitzt [19]. Wilson-Fermionen brechen die chirale Symmetrie vollkommen und sind daher zur Untersuchung des chiralen Phasenübergangs nicht so sehr geeignet. Benutzt

man die staggered Diskretisierung für Fermionen, so besitzt die Gitterwirkung für n Spezies von staggered Fermionen immerhin noch eine $U(n) \times U(n)$-Symmetrie, und erst im Kontinuumslimes hat man wieder die chirale $SU(N_f) \times SU(N_f)$-Symmetrie mit $N_f = 4n$. Für $n = 1$ erwartet man demnach eine effektive Theorie in der Universalitätsklasse eines 3-dimensionalen O(2)-symmetrischen Spinmodells, was in [20] im starken Kopplungslimes gezeigt wurde. Man muß daher darauf achten, ob die Dynamik noch von den Symmetrien des Gitter beherrscht wird, oder der Gitterabstand bereits so klein ist, daß man Kontinuumsphysik extrahiert. Um den Fall $N_f = 2$ simulieren zu können, zieht man aus der Fermiondeterminante noch die Wurzel. Es ist dabei nicht klar, welchen Einfluß dies auf die Symmetrien des Gitters hat. Es ist also möglich, daß man bei Simulationen zunächst O(2)-Exponenten sieht und erst später, näher am Kontinuumslimes die erwarteten O(4)-Exponenten. Es wäre daher wünschenswert, wenn man numerisch zwischen O(2)- und O(4)-Exponenten unterscheiden könnte. Leider liegen die beiden Alternativen jedoch so eng beieinander, daß man noch auf präzisere Simulationen warten muß, bevor man zwischen beiden unterscheiden kann. Zu zeigen, daß die gefundenen Exponenten keine Mean-Field-Exponenten sind, ist jedoch erheblich einfacher.

Zusammenfassung

In dieser Arbeit wurde das dreidimensionale O(4)-symmetrische Heisenbergmodell untersucht. Die Simulationen wurden mit dem Clusteralgorithmus nach Wolff durchgeführt. Dabei galt das Interesse der Bestimmung der universellen kritischen Exponenten.

Zunächst wurde die kritische Kopplung mit zwei unabhängigen Methoden, der Binderkumulanten-Methode und der χ^2-Methode, bestimmt:

$$\beta_c = 0.93590(5).$$

Die kritischen Exponenten β, γ und ν wurden dann unter Anwendung der Finite-Size-Scaling-Methode bestimmt:

$$\begin{aligned} \beta &= 0.3889(24) \\ \gamma &= 1.4895(72) \\ \nu &= 0.7558(33). \end{aligned}$$

Die anderen kritischen Exponenten wurden dann aus Skalenrelationen bestimmt. Die Ergebnisse sind konsistent mit Ergebnisse der $4-\epsilon$ Entwicklung und einer weiteren ebenfalls numerischen Studie.

Es wurden noch Daten aus einer Simulation der 2-flavour-QCD in der staggered-Fermion-Diskrerisierung auf einem $12^3 \times 4$-Gitter analysiert. Dabei wurde das Skalenverhalten pseudokritischer Kopplungen untersucht und daraus die Exponentenkombination $1/\beta\delta$ bestimmt:

$$\frac{1}{\beta\delta} = 0.60(6).$$

Dieser Wert ist jedoch nicht genau genug bestimmt, um zwischen dem O(4)-Wert und dem Mean-Field-Wert zu unterscheiden.
Weiterhin wurde das Skalenverhalten des chiralen Kondensats untersucht und die

Volumenabhängigkeit der Peakhöhen der chiralen Suszeptibilität diskutiert. Aus der Analyse des chiralen Kondensats ergab sich ein Wert

$$\frac{1}{\delta} = 0.348(12). \tag{3.44}$$

Während also die kritischen Exponenten für das dreidimensionale O(4)-symmetrische Heisenbergmodell präzise bestimmt sind, ist die Situation für die 2-flavour-QCD noch nicht so weit gediehen, als daß definitive Aussagen gemacht werden könnten. Es wäre daher wünschenswert, die 2-flavour-QCD noch weiter zu untersuchen, um die Hypothese, daß sie in derselben Universalitätsklasse liegt wie das dreidimensionale O(4)-symmetrische Heisenbergmodell, bestätigen zu können.

Anhang A

Ergebnisse in tabellarischer Form

L	Kopplung β	# Messungen	g_n
8	0.960	399900	6.45
8	0.936	399900	7.37
8	0.910	399900	8.76
8	0.887	399900	10.09
8	0.858	399900	11.86
8	0.840	399900	12.84
10	0.950	399900	8.48
10	0.936	399900	9.69
10	0.920	399900	11.24
12	0.950	399900	9.81
12	0.936	479900	11.62
12	0.920	599900	14.80
12	0.905	399900	17.69
12	0.888	399900	22.99
14	0.945	399850	12.10
14	0.936	399850	14.16
14	0.925	399850	17.14
14	0.913	399850	21.53
16	0.945	399700	13.33
16	0.936	479700	16.55
16	0.925	599700	20.27
16	0.915	399700	26.13
16	0.905	399700	32.89
16	0.895	399700	38.63
24	0.940	399400	22.51
24	0.936	439400	26.14
24	0.930	559400	32.51
24	0.925	399400	39.88
24	0.920	399400	48.94
24	0.915	399400	60.05
32	0.940	398600	27.60
32	0.936	598600	35.62
32	0.932	678600	46.96
32	0.928	398600	58.08
32	0.924	398600	77.32
32	0.920	398600	96.95
48	0.938	606000	46.53
48	0.936	656000	56.58
48	0.934	810000	77.80
48	0.932	191500	96.28
48	0.930	99900	106.00

Tabelle A.1: Run-Parameter

	$l=8$	$l=10$	$l=12$	$l=14$	$l=16$
l'	$\beta_c(l,b)$	$\beta_c(l,b)$	$\beta_c(l,b)$	$\beta_c(l,b)$	$\beta_c(l,b)$
10	0.93721(63)				
12	0.93681(40)	0.93644(68)			
14	0.93664(23)	0.93636(28)	0.93629(70)		
16	0.93644(18)	0.93621(20)	0.93609(35)	0.93594(53)	
24	0.93619(10)	0.93606(10)	0.93601(13)	0.93596(13)	0.93596(18)
32	0.93606(05)	0.93596(08)	0.93594(08)	0.93591(05)	0.93591(08)
48	0.93601(03)	0.93596(03)	0.93594(05)	0.93591(05)	0.93591(05)

Tabelle A.2: Schnittpunkte $\beta_c(l,b)$ der Binderkumulanten der Gittergrößen l und l', mit $b = l'/l$

L	M	χ^v	$dU/d\beta$
8	0.367041 $\pm$ 0.000130	66.2286 $\pm$ 0.0447	0.5609 $\pm$ 0.0021
10	0.327729 $\pm$ 0.000097	103.1530 $\pm$ 0.0574	0.7741 $\pm$ 0.0048
12	0.298495 $\pm$ 0.000145	147.8738 $\pm$ 0.1361	0.9826 $\pm$ 0.0042
14	0.275616 $\pm$ 0.000107	200.2076 $\pm$ 0.1515	1.1912 $\pm$ 0.0087
16	0.257386 $\pm$ 0.000086	260.6261 $\pm$ 0.1637	1.4306 $\pm$ 0.0077
24	0.208971 $\pm$ 0.000127	579.8488 $\pm$ 0.6666	2.4587 $\pm$ 0.0211
32	0.180187 $\pm$ 0.000095	1021.8021 $\pm$ 1.0415	3.5648 $\pm$ 0.0368
48	0.146225 $\pm$ 0.000100	2271.2927 $\pm$ 2.9129	6.1715 $\pm$ 0.0582

Tabelle A.3: Ergebnisse der Ferrenberg-Swendsen-Interpolation für die Magnetisierung M, die Größe χ^v und der Ableitung der Binderkumulanten nach der Kopplung $dU/d\beta$ für $\beta = 0.93590$.

L	β_c	χ^c
12	0.908925 $\pm$ 0.000202	4.76439 $\pm$ 0.00726
16	0.917475 $\pm$ 0.000160	8.43824 $\pm$ 0.00765
24	0.924900 $\pm$ 0.000160	18.75799 $\pm$ 0.03581
32	0.928650 $\pm$ 0.000937	33.32044 $\pm$ 0.09324
48	0.931600 $\pm$ 0.000106	73.87527 $\pm$ 0.45451

Tabelle A.4: Peakpositionen und Peakhöhen der zusammenhängenden Suszeptibilität χ^c.

Literaturverzeichnis

[1] D. J. Groos und F. Wilczek, Phys. Rev. Lett. **30** (1973) 1343;
H. Politzer, Phys. Rev. Lett. **30** (1973) 1346

[2] M.N. Barber, in: Phase Transitions and Critical Phenomena, Vol 8, eds. C.Domb and J.L. Lebowitz, Academic, New York,1983,S. 145

[3] J.L. Cardy, in:Current Physics Sources and Comments, Vol 2, ed. J.L.Cardy, North Holland 1988, S. 1

[4] K.Binder, Z. Phys. **B43** (1981) 119

[5] J.Engels,J.Fingberg und V.K.Mitrjushkin, Phys. Lett. **B298** (1993) 154

[6] N.Metropolis,A.W.Rosenbluth,M.N.Rosenbluth,A.H.Teller und E.Teller, J. Chem. Phys. **21** (1953) 1087

[7] U.Wolff,Phys. Rev. Lett. **62**(1989) 361

[8] A.M.Ferrenberg and R.H.Swendsen,Phys. Rev. Lett. **61** (1988) 2635

[9] A.M.Ferrenberg and R.H.Swendsen,Phys. Rev. Lett. **63** (1989) 1195

[10] Ch.Frick, K.Jansen und P.Seuferling,Phys. Rev. Lett. **63** (1989) 2631
R.Edwards und A.Sokal, Phys. Rev. **D40** (1989) 1374

[11] R.Pisarski und F.Wilczek,Phys. Rev. **D29** (1984) 338

[12] K.Kanaya und S.Kaya,Phys. Rev. **D51** (1995) 2404

[13] P.Peczak, Alan M. Ferrenberg und D.P.Landau,Phys. Rev. **B43** (1991) 6087

[14] J.Engels, S.Mashkevich und T. Scheideler, hep-lat/9509091 (1995)

[15] G.Baker,B.Nickel und D.Meiron,Phys. Rev. **B17** (1978) 1365

[16] A.Kocic und J.Kogut,Phys. Rev. Lett. **74** (1995) 3109

[17] F. Karsch und E. Laermann,Phys. Rev. **D50** (1994) 6954

[18] F.Karsch,Phys. Rev. **D49** (1994) 3791

[19] H.B.Nielsen und M.Ninomiya, Nucl. Phys. **B185** (1981) 20

[20] G.Boyd,J.Fingberg,F.Karsch,L.Kärkkäinen und B.Petersson, Nucl. Phys. **B367** (1992) 199

Danksagung

Diese Arbeit wurde unter Anleitung von Prof. Dr. Frithjof Karsch durchgeführt. Ich danke Herrn Karsch für die hervorragende Betreuung meiner Diplomarbeit und seine ständige Bereitschaft, sich jederzeit mit meinen Fragen und Problemen auseinanderzusetzten. Darüber hinaus möchte allen anderen danken, die mir auf irgendeine Weise während dieser Zeit zur Seite standen.

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

Manfred Oevers