Zustandsgleichungen und Korrelationslänge beim dreidimensionalen Isingmodell mit verbesserter Wirkung

Diplomarbeit

Fakultät für Physik
Universität Bielefeld

vorgelegt von
Michael Seniuch

26. Februar 2002

Inhaltsverzeichnis

Abbildungsverzeichnis

Einleitung

Ein häufig in der Natur auftretendes Phänomen ist das des Phasenüberganges. Dabei wechselt ein physikalisches System abrupt seine makroskopischen Eigenschaften. Ein uns aus dem Alltag bekanntes Beispiel ist der Phasenübergang von Wasser beim Wechsel zwischen festem und flüssigem Aggregatzustand. Phasenübergänge begegnen uns auch beim Übergang zwischen Leiter und Supraleiter oder zwischen ferro- und paramagnetischer Phase einiger Metalle. Ein anderer, für die Hochenergiephysik interessanter Phasenübergang, tritt in der Theorie der starken Kraft, der Quantenchromodynamik (QCD), auf. Die QCD beschreibt die Wechselwirkungen der Quarks, der kleinsten bekannten Bausteine der Kernmaterie, und der Gluonen, den Austauschteilchen der starken Wechselwirkung. Man geht davon aus, daß die Quarks in $N_f = 6$ verschiedenen Arten (flavours) vorkommen. Quarks und Gluonen besitzen eine Farbladung (colour), die in $N_c = 3$ Zuständen vorliegen kann. Eine besondere Eigenschaft der QCD ist das Confinement, welches besagt, daß Quarks nur in farbneutralen, gebundenen Zuständen und nicht als freie Teilchen vorkommen können. Bei genügend hohen Temperaturen oder Materiedichten, wie sie im frühen Universum geherrscht haben, tritt allerdings ein Übergang in die Deconfinement-Phase auf, in der ein Quark-Gluon-Plasma mit freien Quarks vorliegt. Die QCD besitzt eine SU(N_c)-Eichsymmetrie, d. h. für den in der Natur realisierten Fall eine SU(3)-Symmetrie. Von theoretischem Interesse ist jedoch auch die Betrachtung einer SU(2)-Eichtheorie, da auch diese einen Deconfinement-Phasenübergang (zweiter Ordnung) aufweist und insbesondere bei numerischen Simulationen einfacher zu behandeln ist. Der Zusammenhang dieses Modells mit dem dreidimensionalen Isingmodell, mit dem sich diese Arbeit beschäftigt, kann durch die Universalitätshypothese hergestellt werden. Diese besagt, daß verschiedene Modelle trotz unterschiedlicher mikroskopischer Wechselwirkungen gleiches makroskopisches Verhalten bei einem Phasenübergang zeigen können. Das (3+1)-dimensionale SU(2)-Modell und das dreidimensionale Isingmodell liegen in der gleichen Universalitätsklasse. Ebenfalls in diese Klasse läßt sich die reelle skalare ϕ^4-Feldtheorie in drei Dimensionen einordnen, die als Isingmodell mit der sogenannten verbesserten Wirkung in dieser Arbeit untersucht wird. Diese Theorie stellt einen einfachen Ansatz für eine Feldtheorie dar und wurde vielfach untersucht. Daher existieren theoretische Vorhersagen, von denen etliche bereits durch numerische Simulationen bestätigt sind. Obwohl die ϕ^4-

Theorie wie auch das Isingmodell Gegenstand zahlreicher Arbeiten sind, gibt es noch keine numerische Überprüfung der theoretischen Vorhersage zur Zustandsgleichung der Magnetisierung, die den Zusammenhang zwischen Magnetisierung, Temperatur und äußerem Magnetfeld wiedergibt. Ebenso ist die Zustandsgleichung der Korrelationslänge, einem Maß für die Reichweite von Wechselwirkungen innerhalb des Systems, weder numerisch noch theoretisch bekannt. Daher widmet sich diese Arbeit der Bestimmung dieser Zustandsgleichungen mittels Computersimulationen.

Die Analysen im Zusammenhang mit der Korrelationslänge sollen zudem mit denen des O(4)-Spinmodells, welches in Ref. [1] behandelt wird, verglichen werden. Auch das Isingmodell zählt zu den O(N)-Spinmodellen, es stellt den Fall N=1 dar. Das O(4)-Modell besitzt andere kritische Eigenschaften als das Isingmodell und weist zudem den sogenannten Goldstone-Effekt auf, welcher für $N \geq 2$ auftritt und zu einem anderen Verhalten der Korrelationslänge führt.

Der Aufbau der Arbeit gestaltet sich wie folgt.

Im ersten Kapitel werden zunächst das Standard-Isingmodell und das Isingmodell mit der verbesserten Wirkung vorgestellt. Danach wird auf die zu messenden Observablen und dabei insbesondere auf die Korrelationslänge sowie deren verschiedene Bestimmungsmethoden eingegangen.

Das zweite Kapitel beschäftigt sich mit der Theorie der Phasenübergänge, der Universalität und der ihr zugrundeliegenden Renormierungsgruppentheorie. Aus dieser läßt sich das kritische Verhalten der Observablen beim Phasenübergang herleiten.

Im dritten Kapitel werden die ebenfalls auf der Renormierungsgruppentheorie basierenden Zustandsgleichungen der Magnetisierung, der Suszeptibilität und der Korrelationslänge behandelt. Im Anschluß daran werden feldtheoretische Methoden zur Bestimmung der Zustandsgleichung der Magnetisierung vorgestellt. Dazu bedient man sich spezieller Parametrisierungen der Zustandsgleichung.

Die für diese Arbeit wichtigen numerischen Methoden werden im vierten Kapitel dargelegt. Dabei wird kurz auf Monte-Carlo-Simulationen und die verwendeten Algorithmen sowie auf die Fehleranalyse der Daten eingegangen.

Im fünften und letzten Kapitel werden die numerischen Resultate präsentiert. Nach einigen allgemeinen Betrachtungen werden zunächst Normierungsfaktoren berechnet und anschließend die oben genannten Zustandsgleichungen bestimmt. Die Zustandsgleichung der Magnetisierung wird dann mit theoretischen Vorhersagen verglichen.

Kapitel 1

Spinmodelle

1.1 Das Isingmodell

Als einfaches Modell eines Ferromagneten führte W. Lenz 1920 das später nach E. Ising benannte Isingmodell ein. Hierbei wird eine kubische Gitterstruktur in d Raumdimensionen mit zyklischen Randbedingungen betrachtet. Jeder einzelne der n Gitterplätze ist mit einer Variablen, dem sogenannten Spin, besetzt, welcher einem Elementarmagneten in einem ferromagnetischen Festkörper entspricht. Im Isingmodell nimmt man nun an, daß diese Spins nur zwei Orientierungsmöglichkeiten besitzen, die im folgenden als „up“ und „down“ bezeichnet werden. Die gegenseitige kurzreichweitige Wechselwirkung der Spins untereinander soll sich vereinfacht nur auf die unmittelbaren Nachbarspins erstrecken. Zusätzlich soll jeder Spin mit einem äußeren Magnetfeld wechselwirken.
Die Wirkung, welche das Isingmodell beschreibt, ist demnach definiert durch

$$\beta\,\mathcal{H} \;=\; -J \sum_{<i,j>} s_i \cdot s_j \;-\; H \sum_i s_i, \tag{1.1}$$

wobei die Spins s_i $(i = 1, ..., n)$ nur die Werte $+1$ (up) oder -1 (down) annehmen können. Der Ausdruck $< i, j >$ bedeutet, daß nur über die nächsten Nachbarn summiert wird. Der Kopplungsparameter J wird als inverse Temperatur $1/T$ betrachtet. Für $J > 0$ versuchen benachbarte Spins, sich parallel auszurichten. Bei vorhandenem äußeren Magnetfeld $H > 0$ ist eine parallele Orientierung zu diesem günstiger, da die Wirkung minimiert wird.
Im Fall $H = 0$ besitzt die Wirkung eine Z_2-Symmetrie, d. h., Gleichung (1.1) bleibt invariant unter der globalen Transformation $s_i \to -s_i$ für $i = 1, ..., n$. Bei einer gegebenen Temperatur T, welche oberhalb einer kritischen Temperatur T_c liegt, weist

das physikalische System diese Symmetrie auf. Unterschreitet das System jedoch die kritische Temperatur, so wird die ursprünglich vorhandene Symmetrie zerstört, obwohl der Hamiltonoperator symmetrisch ist. Die tatsächliche Lösung zeichnet eine Richtung aus, die Symmetrie ist spontan gebrochen. Die Spins richten sich auch auf größeren Abständen bevorzugt parallel aus. Durch ein externes Feld $H \neq 0$ wird die Symmetrie immer explizit gebrochen.
Das Isingmodell ist ein Spezialfall einer Reihe von Modellen, den sogenannten O(N)-symmetrischen nicht-linearen σ-Modellen. Hierbei sind die Spins keine skalaren Variablen, sondern N-dimensionale Einheitsvektoren, und der Hamiltonoperator $\mathcal{H}$ besitzt ohne äußeres Feld eine O(N)-Symmetrie. Das Isingmodell stellt also den Fall $\mathrm{N} = 1$ dar.

1.2 Verbesserte Wirkung

Statt des oben beschriebenen Isingmodells mit der Wirkung (1.1) betrachten wir nun ein ähnliches Spinmodell auf einem dreidimensionalen kubischen Gitter mit periodischen Randbedingungen. Nun sollen die Spins aber nicht mehr auf die Werte ± 1 beschränkt seien, und die Wirkung wird außerdem durch weitere Terme modifiziert. Sie ist in diesem Modell gegeben durch

$$\beta\mathcal{H} \;=\; -J\sum_{<i,j>}\phi_i\cdot\phi_j \;+\; \sum_i {\phi_i}^2 \;+\; \lambda\sum_i\left({\phi_i}^2-1\right)^2 \;-\; H\sum_i\phi_i, \tag{1.2}$$

wobei die Spinvariablen ϕ_i einen beliebigen reellen Wert annehmen können und λ ein positiver reeller Parameter ist. Diese Wirkung resultiert aus der Landau-Ginzburg-Theorie. L. D. Landau und W. L. Ginzburg machten den phänomenologischen Ansatz einer reellen skalaren Feldtheorie, in der die Lagrangefunktion in der Kontinuumformulierung gegeben ist durch

$$\mathcal{L} \;=\; \frac{1}{2}(\partial_\mu\phi)^2 \;+\; \frac{m^2}{2}\phi^2 \;+\; \frac{g}{4!}\phi^4 \;-\; h\phi \tag{1.3}$$

mit $g > 0$. Wird diese Theorie auf einem Gitter diskretisiert, so resultiert daraus die euklidische Wirkung

$$S_E \;=\; -\kappa\sum_{<i,j>}\phi_i\cdot\phi_j \;+\; \frac{1}{2}\sum_i\phi_i^2 \;+\; \tilde{\lambda}\sum_i\phi_i^4 \;-\; h\sum_i\phi_i, \tag{1.4}$$

wobei die Kopplungen m und g durch die Parameter κ und $\tilde{\lambda}$ kompensiert sind. Wählt man statt des Terms $\tilde{\lambda}\sum_i\phi_i^4$ die Variante $\lambda/2\sum_i(\phi_i^2-1)^2$, so entspricht dies lediglich einer Umdefinierung aller Kopplungen in (1.4), und man erhält bis auf einen multiplikativen Faktor die Wirkung (1.2). Der Grenzfall $\lambda \to \infty$ liefert

dann das einfache Isingmodell, da hierdurch die Spinlängen auf den Betrag eins beschränkt werden müssen. Für $\lambda = 0$ erhält man das Gaußmodell, welches hier jedoch nicht weiter betrachtet werden soll. Da in Gleichung (1.2) ϕ_i bis zur vierten Potenz vorkommt, wird das Modell auch als skalares ϕ^4-Modell bezeichnet. Für $H = 0$ liegt wie bei (1.1) eine Z_2-Symmetrie vor.
Es ist wichtig anzumerken, daß das ϕ^4- ebenso wie das Isingmodell eine kritische Temperatur T_c besitzt, bei der die Symmetrie spontan gebrochen wird. Im Falle von ϕ^4 ist T_c allerdings vom Parameter λ abhängig.
Die im folgenden definierten Observablen lassen sich in der Nähe von T_c und $H \to 0$ durch ein kritisches Verhalten beschreiben (Skalengesetze), das für beide betrachteten Modelle gleich (universell) ist. Man spricht von derselben Universalitätsklasse, worauf in Kapitel 2.2 noch ausführlich eingegangen wird. Daher lassen sich die kritischen Phänomene dieser Universalitätsklasse sowohl durch das Isingmodell als auch mit Hilfe des ϕ^4-Modells untersuchen.
Die Nützlichkeit der Wirkung (1.2), die im Vergleich zu (1.1) komplizierter ist, kann in vollem Umfang erst im Rahmen der Renormierungsgruppentheorie erörtert werden. Um den Sinn und Zweck dennoch zu verdeutlichen, sei hier kurz angemerkt, daß die führenden Terme von Skalengesetzen nur unmittelbar für den Grenzfall $T \to T_c$ und $H \to 0$ gelten. In der Nähe sind noch Korrekturen („Corrections to Scaling“) zu berücksichtigen (vgl. Kapitel 2.4), die durch geeignete Wahl von λ minimiert werden können. Dann wird (1.2) als verbesserte Wirkung bezeichnet. Da das Isingmodell relativ große Corrections to Scaling aufweist, wie numerische Simulationen zeigen [2], wird in dieser Arbeit die verbesserte Wirkung verwendet, um das Problem von zusätzlichen Korrekturen zu verringern.

1.3 Observablen

Die Erwartungswerte von thermodynamischen Größen werden mittels der Zustandssumme Z definiert. Diese ist gegeben durch

$$Z = \int \mathcal{D}\sigma \, e^{-\beta\mathcal{H}(\sigma)}, \tag{1.5}$$

wobei über alle Zustände σ integriert wird. Aus der Zustandssumme leitet sich die freie Energie F bzw. die freie Energiedichte f ab

$$F(T,H,V) = -T \ln Z, \tag{1.6}$$

$$f(T,H,V) = \frac{1}{T\,V} F(T,H,V) = -\frac{1}{V} \ln Z. \tag{1.7}$$

Der Ordnungsparameter des Systems ist die Magnetisierung m, die sich durch Differentiation der freien Energiedichte nach H ergibt

$$m = -\left(\frac{\partial f}{\partial H}\right)_T = \left\langle \frac{1}{V}\sum_i \phi_i \right\rangle = \langle \phi \rangle \,. \tag{1.8}$$

Der Erwartungswert $\langle \phi \rangle$ bzw. der Erwartungswert $\langle O \rangle$ einer Observablen O ist allgemein definiert als

$$\langle O \rangle = \frac{1}{Z} \int \mathcal{D}\sigma \, O(\sigma) \, e^{-\beta \mathcal{H}(\sigma)}. \tag{1.9}$$

Die Suszeptibilität χ ist die Ableitung der Magnetisierung nach H:

$$\chi = \left(\frac{\partial m}{\partial H}\right)_T = -\left(\frac{\partial^2 f}{\partial H^2}\right)_T = V\left(\langle \phi^2 \rangle - m^2\right). \tag{1.10}$$

Da in dieser Arbeit die Ergebnisse mit denen des O(4)-Spinmodells verglichen werden, soll hier ebenfalls kurz die Vorgehensweise im mehrdimensionalen Fall beschrieben werden. Beim O(N)-Modell besitzt ein Spinvektor $\mathbf{s}_i$ wie auch der Magnetfeldvektor $\mathbf{H}$ N Komponenten. Es ist sinnvoll, den Vektor $\mathbf{s}_i$ in eine longitudinale, zu $\mathbf{H}$ parallele Komponente, und in einen transversalen Anteil senkrecht zu $\mathbf{H}$ zu zerlegen

$$\mathbf{s}_i = s_i^{\parallel} \, \hat{\mathbf{H}} + \mathbf{s}_i^{\perp}. \tag{1.11}$$

Die longitudinale Richtung der Magnetisierung ist der Ordnungsparameter m, die Suszeptibilität wird wiederum in einen parallelen χ_L und einen senkrechten Anteil χ_T aufgespalten. Man erhält die Zusammenhänge

$$m = \left\langle \frac{1}{V}\sum_i s_i^{\parallel} \right\rangle = \left\langle s^{\parallel} \right\rangle, \tag{1.12}$$

$$\chi_L = V\left(\left\langle {s^{\parallel}}^2 \right\rangle - m^2\right), \tag{1.13}$$

$$\chi_T = V\frac{1}{N-1}\left\langle {\mathbf{s}_i^{\perp}}^2 \right\rangle. \tag{1.14}$$

Der Vergleich der Ergebnisse vom Ising- und O(4)-Modell kann sich natürlich nur auf die jeweiligen longitudinalen Größen beschränken.
Neben der Magnetisierung und der Suszeptibilität existieren weitere Observablen, die eine zentrale Rolle dieser Arbeit darstellen. Dies sind die Korrelationsfunktion und die Korrelationslänge, auf die im folgenden Abschnitt näher eingegangen werden soll.

1.4 Die Korrelationslänge

Die Wechselwirkungen zwischen verschiedenen Teilen des Spinsystems lassen sich mit Hilfe der sogenannten Korrelationsfunktionen messen. Die zusammenhängende Zweipunkt-Korrelationsfunktion ist ein Maß für die Korrelation von zwei Spins auf den Gitterplätzen $\mathbf{x}$ und $\mathbf{y}$. Sie wird definiert durch

$$G(\mathbf{x},\mathbf{y}) \;=\; \langle \phi_{\mathbf{x}}\phi_{\mathbf{y}}\rangle \;-\; \langle \phi_{\mathbf{x}}\rangle \langle \phi_{\mathbf{y}}\rangle \,. \tag{1.15}$$

Dabei sind die Indizes $\mathbf{x}$ und $\mathbf{y}$ räumliche Vektoren, welche die Position der Spins im Gitter angeben. Aufgrund der Translationsinvarianz des Gitters und der Isotropie in den drei Raumrichtungen hängt G nur vom Abstand $r = |\mathbf{x} - \mathbf{y}|$ ab. Weiterhin sind die Erwartungswerte $\langle \phi_{\mathbf{x}}\rangle$ und $\langle \phi_{\mathbf{y}}\rangle$ unabhängig von $\mathbf{x}$ bzw. $\mathbf{y}$, so daß sich G schreiben läßt als

$$G(r) \;=\; \langle \phi_{\mathbf{x}}\phi_{\mathbf{0}}\rangle \;-\; \langle \phi\rangle^2 \;=\; \langle \phi_{\mathbf{x}}\phi_{\mathbf{0}}\rangle_c \,, \tag{1.16}$$

wobei r für den Abstand zwischen den Spins $\phi_{\mathbf{x}}$ und $\phi_{\mathbf{0}}$ steht und der Index c den zusammenhängenden Anteil („connected part“) der Korrelationsfunktion kennzeichnet. Über das Fluktuations-Dissipations-Theorem hängt die Suszeptibilität χ mit der Korrelationsfunktion zusammen. χ läßt sich ausdrücken durch die Fouriertransformierte $\tilde{G}$ von G bei Impuls null

$$\begin{aligned}
\chi \;=\; \tilde{G}(0) \;&=\; \sum_{\mathbf{x}} G(r) \\
&=\; \sum_{\mathbf{x}} \langle \phi_{\mathbf{x}}\phi_{\mathbf{0}}\rangle \;-\; \sum_{\mathbf{x}} \langle \phi\rangle^2 \\
&=\; V\left(\left\langle \frac{1}{V}\sum_{\mathbf{x}} \phi_{\mathbf{x}}\phi_{\mathbf{0}} \right\rangle \;-\; \langle \phi\rangle^2\right) \\
&=\; V\left(\left\langle \phi^2\right\rangle \;-\; \langle \phi\rangle^2\right) .
\end{aligned} \tag{1.17}$$

Die Korrelationsfunktion fällt für große Abstände exponentiell ab

$$G(r) \underset{r\to\infty}{\sim} \exp\left(-\frac{r}{\xi^{exp}}\right) . \tag{1.18}$$

Dabei ist ξ^{exp} die sogenannte exponentielle Korrelationslänge, die somit ein Maß für die Ausdehnung von lokalen Fluktuationen darstellt.
ξ^{exp} ist allerdings eine auf dem Gitter schwer zu bestimmende Größe, da (1.18) nur im Limes $r \to \infty$ gilt, das Gitter jedoch auf die Länge $L = V^{1/d}$ begrenzt ist.
Neben dem Abfall von $G(r)$ mit ξ^{exp} tragen im allgemeinen noch höhere Zustände mit kleineren Korrelationslängen bei. Ist dieser Beitrag gegenüber ξ^{exp} nur gering, so liefert der einfache Ansatz

$$G(r) \;\sim\; \exp\left(-\frac{r}{\xi}\right) \tag{1.19}$$

mit endlichem $r \leq L$ eine recht gute Schätzung für ξ^{exp}. Betrachtet man die Korrelationsfunktion im Abstand r und $r + \Delta$, so läßt sich daraus eine effektive Korrelationslänge ξ^{eff} abschätzen mit

$$\xi^{eff}(r, \Delta) \; = \; \frac{\Delta}{\ln G(r) - \ln G(r + \Delta)}. \tag{1.20}$$

Es zeigt sich, daß die Korrelationslänge bei Annäherung an die kritische Temperatur wächst und direkt bei T_c im Grenzfall $V \to \infty$ divergiert. Die Divergenz ist auf einem endlichen Gitter natürlich nicht zu messen, da hier alle Größen ebenfalls endlich bleiben. Die Korrelationslänge kann nur sinnvoll im Bereich $\xi \lesssim L/2$ gemessen werden, denn aufgrund der periodischen Randbedingungen ist dies der größtmögliche Abstand zweier Gitterplätze.
Im Fall von großem ξ müssen die periodischen Randbedingungen im Ansatz (1.19) berücksichtigt werden. Daher liefert

$$G(r) \; \sim \; \left(\exp\left(-\frac{r}{\xi} \right) + \exp\left(-\frac{L - r}{\xi} \right) \right) \tag{1.21}$$

eine bessere Schätzung für die wahre Korrelationslänge.

Eine weitere Möglichkeit, die Korrelationslänge zu ermitteln, liegt in der Berechnung der sogenannten 2nd-Moment-Korrelationslänge, die über das zweite Moment μ_2 der Korrelationsfunktion definiert ist [3]

$$\xi^{2nd} \; = \; \left(\frac{\mu_2}{2d\mu_0} \right)^{\frac{1}{2}}. \tag{1.22}$$

Hierbei ist μ_2 gegeben durch

$$\begin{aligned} \mu_2 \; &= \; \sum_{\mathbf{x}} x^2 \left\langle \phi_{\mathbf{0}} \phi_{\mathbf{x}} \right\rangle_c \\ &= \; \sum_{\mathbf{x}} \sum_{i=1}^{d} x_i^2 \left\langle \phi_{\mathbf{0}} \phi_{\mathbf{x}} \right\rangle_c , \end{aligned} \tag{1.23}$$

wobei x_i die einzelnen Raumkomponenten bezeichnet. Beschränkt man sich nun aufgrund der Isotropie auf eine Richtung (z. B. x_1), so folgt

$$\mu_2 \; = \; d \sum_{\mathbf{x}} x_1^2 \left\langle \phi_{\mathbf{0}} \phi_{\mathbf{x}} \right\rangle_c . \tag{1.24}$$

Entsprechend ist μ_0 definiert als

$$\mu_0 \; = \; \sum_{\mathbf{x}} \left\langle \phi_{\mathbf{0}} \phi_{\mathbf{x}} \right\rangle_c , \tag{1.25}$$

was nach Gleichung (1.17) identisch mit der Suszeptibilität χ ist.
Betrachten wir im folgenden den Spezialfall eines dreidimensionalen kubischen Gitters, welcher in unserem zu untersuchenden Modell vorliegt. Ein Gitterplatz $\mathbf{x}$ sei mit den Koordinaten x, y, z gekennzeichnet. Statt die Korrelationsfunktion wie in (1.16) zwischen einzelnen Spins zu bestimmen, lassen sich ebenso die Korrelationen zwischen einzelnen Ebenen von Spins im Gitter messen. Wir definieren dazu die Magnetisierung einer Spinebene senkrecht zu einer Normalenrichtung, z. B. der z-Richtung, als

$$S_z \;=\; \frac{1}{L^2}\sum_x\sum_y \phi_{x,y,z}. \tag{1.26}$$

Das Gittermittel der Ebenen entspricht dabei dem der Einzelspins

$$S \;=\; \frac{1}{L}\sum_{z=1}^{L} S_z \;=\; \phi. \tag{1.27}$$

Für den Erwartungswert von S_z gilt aufgrund der Translationsinvarianz

$$\langle S_z\rangle \;=\; \langle S\rangle \;=\; \langle\phi\rangle\,. \tag{1.28}$$

Damit läßt sich eine Ebenen-Korrelationsfunktion $\bar{G}(z)$ gemäß

$$\bar{G}(z) \;=\; L^2\left(\langle S_0 S_z\rangle \;-\; \langle S\rangle^2\right) \tag{1.29}$$

definieren, wobei z den Abstand der betrachteten Spinebenen beschreibt. Die so definierte Korrelationsfunktion ist nicht identisch mit der Zweipunkt-Korrelationsfunktion $G(r)$. Jedoch gilt ein zu Gleichung (1.17) analoger Zusammenhang zwischen $\bar{G}(z)$ und der Suszeptibilität χ, nämlich

$$\begin{aligned}
\chi \;&=\; \sum_z \bar{G}(z) \\
&=\; \sum_z L^2\left(\langle S_0 S_z\rangle \;-\; \langle S\rangle^2\right) \\
&=\; L^2\left(L\left\langle S_0\frac{1}{L}\sum_z S_z\right\rangle \;-\; \sum_z\langle\phi\rangle^2\right) \\
&=\; L^3\left(\left\langle\phi^2\right\rangle \;-\; \langle\phi\rangle^2\right).
\end{aligned} \tag{1.30}$$

Bei der tatsächlichen Berechnung kann zur Verbesserung der Statistik über die drei Raumrichtungen ein Mittelwert gebildet werden, und man erhält die Ebenen-Korrelationsfunktion

$$\bar{G}(\tau) \;=\; L^2\left\langle S_0 S_\tau\right\rangle_c \;=\; \frac{1}{3}\left(\bar{G}(x) \;+\; \bar{G}(y) \;+\; \bar{G}(z)\right)\Big|_{\tau=x=y=z}. \tag{1.31}$$

Die Korrelationslänge läßt sich ebenso mit Hilfe von $\bar{G}(\tau)$ über die zuvor beschriebenen Ansätze ermitteln. Berechnet man hiermit die Momente μ_2 und μ_0, so ergibt sich eine zu Gleichung (1.24) analoge Beziehung

$$\begin{aligned} \mu_2 &= d\sum_\tau \tau^2 \bar{G}(\tau) \\ &= dL^2 \left(\sum_\tau \tau^2 \left\langle S_0 S_\tau \right\rangle_c \right). \end{aligned} \tag{1.32}$$

Die Summe über τ erstreckt sich dabei über L Werte, welche unter Berücksichtigung der periodischen Randbedingungen $\tau = -L/2+1, \ldots, L/2$ entsprechen, wobei L als gerade angenommen wird. Beachtet man $\bar{G}(-\tau) = \bar{G}(\tau)$, so folgt

$$\mu_2 = dL^2 \left(\left(\frac{L}{2}\right)^2 \left\langle S_0 S_{\frac{L}{2}} \right\rangle_c + 2\sum_{\tau=1}^{\frac{L}{2}-1} \tau^2 \left\langle S_0 S_\tau \right\rangle_c \right). \tag{1.33}$$

Entsprechend folgt für μ_0

$$\begin{aligned} \mu_0 &= \sum_\tau \bar{G}(\tau) \\ &= L^2 \left(\sum_\tau \left\langle S_0 S_\tau \right\rangle_c \right) \\ &= L^2 \left(\left\langle S_0 S_0 \right\rangle_c + \left\langle S_0 S_{\frac{L}{2}} \right\rangle_c + 2\sum_{\tau=1}^{\frac{L}{2}-1} \left\langle S_0 S_\tau \right\rangle_c \right). \end{aligned} \tag{1.34}$$

Es sei betont, daß das nach Gleichung (1.22) definierte ξ^{2nd} nicht mit der exponentiellen Korrelationslänge übereinstimmt, sondern nur eine Näherung darstellt. Ausgehend von der einfachen Annahme (1.19) einer mit ξ abfallenden Korrelationsfunktion, läßt sich mit folgenden Überlegungen der Zusammenhang zwischen ξ und ξ^{2nd} verdeutlichen. Mit dem Ansatz, daß sich die Korrelationsfunktion auf dem Gitter gemäß $G \sim \exp[-(x_1 + x_2 + \ldots + x_d)/\xi]$ verhält, ergibt sich entsprechend der Definition (1.24) für μ_2

$$\begin{aligned} \mu_2 &\sim d\sum_{\mathbf{x}} x_1^2\, e^{-(x_1+x_2+\ldots+x_d)/\xi} \\ &= d\sum_{x_1\, x_2 \ldots x_d} x_1^2\, e^{-(x_1+x_2+\ldots+x_d)/\xi} \\ &= d\sum_{x_2\ldots x_d} e^{-(x_2+\ldots+x_d)/\xi} \sum_{x_1} x_1^2\, e^{-x_1/\xi}. \end{aligned} \tag{1.35}$$

Entsprechend gilt für μ_0

$$\begin{aligned}\mu_0 &\sim \sum_{\mathbf{x}} e^{-(x_1+x_2+\ldots+x_d)/\xi} \\ &= \sum_{x_2\ldots x_d} e^{-(x_2+\ldots+x_d)/\xi} \sum_{x_1} e^{-x_1/\xi}. \end{aligned} \tag{1.36}$$

Somit erhält man mit (1.35) und (1.36)

$$\begin{aligned}\left(\frac{\mu_2}{2d\mu_0}\right)^{\frac{1}{2}} &= \left(\frac{\sum_{x_1} x_1^2\, e^{-x_1/\xi}}{2\sum_{x_1} e^{-x_1/\xi}}\right)^{\frac{1}{2}} \\ &\approx \left(\frac{\int_0^\infty x_1^2\, e^{-x_1/\xi}\,\mathrm{d}x_1}{2\int_0^\infty e^{-x_1/\xi}\,\mathrm{d}x_1}\right)^{\frac{1}{2}} \\ &= \xi\,. \end{aligned} \tag{1.37}$$

Dies motiviert unseren Ansatz (1.22).

Schließlich existiert eine weitere, häufig verwendete Methode zur Berechnung der Korrelationslänge auf dem Gitter. Diese basiert auf der Fouriertransformierten der Korrelationsfunktion bei dem kleinsten, nicht-verschwindenden Impuls $|\mathbf{p}| = 2\pi/L$. Die Fouriertransformierte ist definiert als

$$\tilde{G}(\mathbf{p}) \;=\; \sum_{\mathbf{x}} e^{i\mathbf{p}\mathbf{x}} \left(\langle\phi_{\mathbf{x}}\phi_{\mathbf{0}}\rangle - \langle\phi\rangle^2\right). \tag{1.38}$$

Dieser Ausdruck läßt sich für $\mathbf{p} \neq \mathbf{0}$ weiter vereinfachen (vgl. [1]) zu

$$\tilde{G}(\mathbf{p}) \;=\; \frac{1}{V}\left\langle\left|\sum_{\mathbf{x}} e^{i\mathbf{p}\mathbf{x}}\phi_{\mathbf{x}}\right|^2\right\rangle. \tag{1.39}$$

Betrachtet man nun die drei Raumrichtungen getrennt, so ergibt sich für die Fouriertransformierte der Korrelationsfunktion bei Impuls $\mathbf{p}^{(\mu)} = 2\pi/L\,\mathbf{e}_\mu$ mit dem Einheitsvektor $\mathbf{e}_\mu$ $(\mu = x, y, z)$ z. B. in z-Richtung

$$F_z \;=\; \tilde{G}(\mathbf{p}^{(z)}) \;=\; \frac{1}{V}\left\langle\left|\sum_{x,y,z} \exp\left(i\frac{2\pi}{L}z\right)\phi_{x,y,z}\right|^2\right\rangle \tag{1.40}$$

sowie analog F_x und F_y für die beiden anderen Richtungen. Die Summe über diese drei Werte liefert eine mittlere Fouriertransformierte F

$$F \;=\; \frac{1}{3}\left(F_x + F_y + F_z\right). \tag{1.41}$$

Die Korrelationslänge ξ^F, welche in der Literatur auch als ξ^{2nd} bezeichnet wird, jedoch von dem hier definierten ξ^{2nd} (1.22) zu unterscheiden ist, definiert sich über den Ansatz eines freien Feldes

$$\tilde{G}(\mathbf{p}) \;=\; \frac{Z}{\left(\xi^F\right)^{-2} + 4\sum_{k=1}^{d} \sin^2\left(\frac{p_k}{2}\right)}. \tag{1.42}$$

Für Impuls $\mathbf{p} = \mathbf{0}$ folgt nach (1.17)

$$Z \;=\; \left(\xi^F\right)^{-2} \chi. \tag{1.43}$$

Mit $\mathbf{p} = \mathbf{p}^{(\mu)}$ ergibt sich

$$F \;=\; \tilde{G}(\mathbf{p}^{(\mu)}) \;=\; \frac{Z}{\left(\xi^F\right)^{-2} + 4\sin^2\left(\frac{\pi}{L}\right)}. \tag{1.44}$$

Diese beiden Gleichungen liefern schließlich für die Korrelationslänge ξ^F

$$\xi^F \;=\; \left(\frac{\frac{\chi}{F} - 1}{4\sin^2\left(\frac{\pi}{L}\right)}\right)^{\frac{1}{2}}. \tag{1.45}$$

Kapitel 2

Phasenübergänge und kritische Phänomene

2.1 Phasenübergänge

Phasenübergänge eines physikalischen Systems sind dadurch gekennzeichnet, daß kleine Veränderungen der äußeren Parameter die Veränderung der makroskopischen Eigenschaften des Systems zur Folge haben. Einfache Beispiele für solche Übergänge in der Natur sind der Wechsel des Aggregatzustandes von chemischen Stoffen oder der Übergang zwischen endlicher und verschwindender Magnetisierung eines ferromagnetischen Materials bei Änderung der Temperatur.
Die Phasenübergänge lassen sich klassifizieren in diskrete und kontinuierliche. Diskrete Übergänge sind von erster, kontinuierliche von zweiter oder höherer Ordnung. Charakterisieren läßt sich ein Phasenübergang durch das Verhalten eines sogenannten Ordnungsparameters, einer makroskopischen Größe, die in der einen Phase null und in der anderen Phase ungleich null ist. Per Definition verschwindet der Erwartungswert des Ordnungsparameters am kritischen Punkt. Die Wahl dieses Parameters ist nicht immer eindeutig, doch in vielen Fällen naheliegend, wie etwa die Magnetisierung bei einem ferromagnetischen Übergang.
Der Ordnungsparameter ist bei einem diskreten Übergang unstetig, weshalb am Übergangspunkt beide Phasen koexistieren. Dies hat zur Folge, daß die Korrelationslänge ξ, welche ein Maß für die Reichweite von lokalen Fluktuationen des Systems ist, hierbei endlich bleibt. Als Beispiel für ein solches Verhalten seien die Übergänge zwischen Festkörpern und Flüssigkeiten oder Flüssigkeiten und Gasen genannt. Bei Phasenübergängen zweiter oder höherer Ordnung hingegen ist der Ordnungsparameter stetig, die Phasen gehen kontinuierlich ineinander über. Zum Beispiel unterliegen ferromagnetische Stoffe bei Erreichen der Curie-Temperatur einem kontinuierlichen

Übergang.
Im folgenden sollen thermodynamische Systeme betrachtet werden, welche einen kontinuierlichen Phasenübergang aufweisen. Die äußeren Parameter sind die Temperatur T und das externe Magnetfeld H. Der Phasenübergang findet bei der kritischen Temperatur T_c statt.

2.2 Universalität und kritische Exponenten

Bei einem physikalischen System, welches einen kontinuierlichen Phasenübergang aufweist, lassen sich die thermodynamischen Größen in der Nähe des kritischen Punktes durch Potenzgesetze beschreiben. Man definiert zunächst die dimensionslose reduzierte Temperatur $\tilde{t}$

$$\tilde{t} \;=\; \frac{T - T_c}{T_c}. \tag{2.1}$$

Dann gilt für eine Observable O mit kritischem Verhalten im Grenzfall $\tilde{t} \to 0$

$$O \;\sim\; \tilde{t}^{\varphi} \tag{2.2}$$

mit φ als sogenanntem kritischen Exponenten. Für die folgenden Observablen finden sich im Limes $H \to 0^+$ die Zusammenhänge:
Für die spontane Magnetisierung m gilt für $\tilde{t} < 0$

$$m \;\sim\; (-\tilde{t})^{\beta}. \tag{2.3}$$

Die Suszeptibilität χ divergiert gemäß des Zusammenhangs

$$\chi \;\sim\; |\tilde{t}|^{-\gamma}. \tag{2.4}$$

Ähnlich verhält sich die Korrelationslänge ξ. Hierbei findet man

$$\xi \;\sim\; |\tilde{t}|^{-\nu}. \tag{2.5}$$

Exakt am kritischen Punkt, d. h. bei $\tilde{t} = 0$ und $H = 0$, ergibt sich für die Korrelationsfunktion $G(r)$ ein Potenzverhalten in r

$$G(r) \;\sim\; \frac{1}{r^{d-2+\eta}} \tag{2.6}$$

mit dem kritischen Exponenten η, welcher auch anomale Dimension genannt wird. Auch im Fall von $\tilde{t} = 0$, d. h. auf der kritischen Linie, existieren einfache Potenzgesetze, welche das Verhalten der Observablen bei kleinem Feld $H > 0$ beschreiben.
So gilt für die Magnetisierung

$$m \;\sim\; H^{\frac{1}{\delta}}. \tag{2.7}$$

Die Suszeptibilität verhält sich wie

$$\chi \sim H^{-\gamma_c} \tag{2.8}$$

und die Korrelationslänge gemäß

$$\xi \sim H^{-\nu_c}. \tag{2.9}$$

Die oben genannten kritischen Exponenten sind allerdings nicht alle unabhängig voneinander. Sie sind durch sogenannte Skalengesetze miteinander verknüpft:

$$\begin{aligned} \gamma &= (2-\eta)\nu, \\ \gamma &= \beta(\delta-1), \\ \nu_c &= \nu/\beta\delta, \\ \gamma_c &= \gamma/\beta\delta, \\ d\nu &= \beta(\delta+1). \end{aligned} \tag{2.10}$$

Es zeigt sich, daß verschiedene Systeme die gleichen kritischen Exponenten sowie auch gleiche kritische Amplitudenverhältnisse aufweisen. Man faßt deshalb Systeme mit gleichen kritischen Parametern in einer Universalitätsklasse zusammen. Diese hängt nur von der räumlichen Dimension d, von der Dimension D des Ordnungsparameters und von der Symmetrie der Wechselwirkungen ab. Die theoretische Grundlage dieser Universalität liefert die Renormierungsgruppentheorie.

2.3 Renormierungsgruppentheorie

Hinter der Renormierungsgruppentheorie steht die Idee, daß für das kritische Verhalten eines Systems nur die langreichweitigen Wechselwirkungen eine Rolle spielen. Deshalb lassen sich auch Systeme, die auf kurzreichweitigen Längenskalen unterschiedlich wechselwirken, trotzdem in eine Universalitätsklasse einordnen.
Die Renormierungstechnik kann mit verschiedenen Ansätzen realisiert werden, sowohl durch Renormierung im Impuls- als auch im Ortsraum des Systems. Für Gittermodelle bietet sich die Vorgehensweise im Ortsraum an.
Man betrachtet sogenannte Blockspintransformationen, welche das Gitter mit einem Faktor b reskalieren. Abbildung 2.1 zeigt eine Konfiguration in einem zweidimensionalen System mit zwei Spinzuständen, wie etwa dem Isingmodell. Der Abstand zwischen den Gitterplätzen ist die Gitterkonstante a. Nun werden Blöcke mit der Kantenlänge ba zu jeweils einem neuen Spin zusammengefaßt. Der Zustand eines neuen Spins ergibt sich in sinnvoll definierter Weise aus den Zuständen der jeweiligen Einzelspins des Blocks. Die Wahl kann z. B. derart erfolgen, daß die neue

Variable den Zustand annimmt, welcher im Block am häufigsten auftritt. In Abbildung 2.1 ist dies für den Fall $b = 3$ dargestellt. Um den Prozeß der Renormierung abzuschließen, müssen alle Dimensionen des Gitters um den Faktor b reduziert werden, um wieder zum ursprünglichen Gitter mit der Gitterkonstanten a zu gelangen. Durch die Transformation ändert sich das System in der Regel, abhängig von seinem Anfangszustand. Befand es sich zuvor bei hohen Temperaturen, also im Bereich $T > T_c$, so werden durch wiederholt ausgeführte Blockspintransformationen eventuell lokal auftretende geordnete Gebiete zerstört, und das System wird immer ungeodneter, strebt also zu immer größeren Temperaturen. Startet man hingegen in der kalten Phase ($T < T_c$), so führt die Iteration zu wachsender Ordnung, und es bildet sich eine Vorzugsrichtung aus. Am kritischen Punkt jedoch beobachtet man eine Skaleninvarianz, d. h., die Konfigurationen sehen auf allen Längenskalen gleich aus.

Die Renormierungsgruppentransformationen sind im unendlichdimensionalen Raum aller möglichen Hamiltonoperatoren definiert. Die Kopplungen, von denen der das Modell beschreibende Hamiltonoperator $\mathcal{H}$ abhängt, lassen sich als Vektor $\mathbf{K} = (K_1, K_2, K_3, ...)$ auffassen. Durch die Transformation ändern sich $\mathcal{H}$ und dessen Abhängigkeit von $\mathbf{K}$ im allgemeinen, d. h., die Renormierung bewirkt eine Verschiebung des Vektors $\mathbf{K}$ im Kopplungsraum. Dies läßt sich durch die Renormierungsgruppengleichung

$$\mathbf{K}' = \mathcal{R}(\mathbf{K}) \tag{2.11}$$

darstellen, wobei $\mathcal{R}$ von der Art der Transformation und vom Skalenfaktor b abhängt. Die Zustandssumme Z muß jedoch invariant unter Transformationen bleiben.

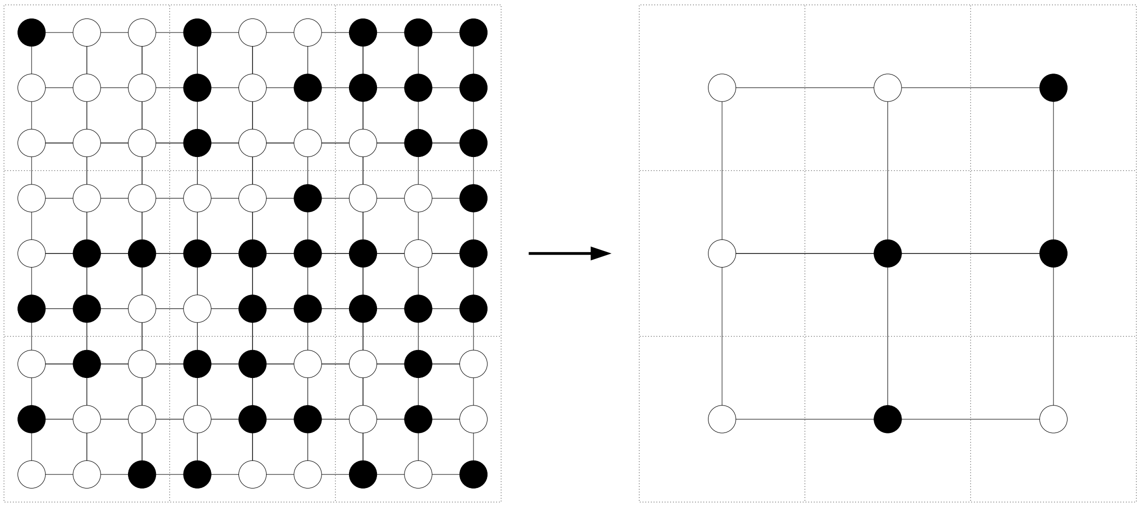

Abbildung 2.1: Blockspintransformation mit $b = 3$.

Angenommen, es existiert ein Fixpunkt $\mathbf{K}^*$, d. h., es gilt

$$\mathbf{K}^* = \mathcal{R}(\mathbf{K}^*), \tag{2.12}$$

und sei $\mathcal{R}$ in $\mathbf{K}^*$ differenzierbar, dann läßt sich in den einzelnen Komponenten der lineare Ansatz

$$K'_a - K^*_a \sim \sum_b T_{ab}\,(K_b - K^*_b) \tag{2.13}$$

mit $T_{ab} = \frac{\partial K'_a}{\partial K_b}|_{\mathbf{K}=\mathbf{K}^*}$ machen. Seien λ^i die Eigenwerte der Matrix $\mathbf{T}$ und $\mathbf{v}^i$ die zugehörigen linksseitigen Eigenvektoren, so können Skalenvariablen u_i definiert werden als

$$u_i \equiv \sum_a v^i_a\,(K_a - K^*_a), \tag{2.14}$$

welche in der Nähe von $\mathbf{K}^*$ linear transformieren

$$\begin{aligned} u'_i &= \sum_a v^i_a(K'_a - K^*_a) \\ &= \sum_{a,b} v^i_a T_{ab}(K_b - K^*_b) \\ &= \sum_b \lambda^i v^i_b(K_b - K^*_b) \\ &= \lambda^i u_i. \end{aligned} \tag{2.15}$$

Mit den Eigenwerten λ^i und dem Skalenfaktor b definiert man die sogenannten Eigenwerte y_i der Renormierungsgruppe über die Beziehung

$$\lambda_i = b^{y_i}. \tag{2.16}$$

Es können die folgenden drei Fälle unterschieden werden:

1. $y_i > 0$. u_i heißt dann relevante Skalenvariable; durch wiederholte Transformationen entfernt sich u_i vom Fixpunkt $\mathbf{K}^*$.

2. $y_i < 0$. u_i heißt irrelevant; durch Transformationen bewegt sich u_i auf den Fixpunkt zu.

3. $y_i = 0$. u_i heißt marginal; es läßt sich unter der Annahme eines linearen Ansatzes keine Aussage machen, ob die Transformationen zum Fixpunkt hin oder von ihm weg führen.

Betrachten wir nun das Isingmodell mit äußerem Magnetfeld, welches ein physikalisches System mit zwei relevanten Skalenvariablen darstellt. Die beiden vorhandenen

Kopplungen, Temperatur T und Magnetfeld H sind mit einer thermischen Skalenvariablen u_t und einer magnetischen Skalenvariablen u_h verknüpft. u_t und u_h sind relevant, ihre zugehörigen Eigenwerte y_t und y_h somit positiv. Darüber hinaus existieren irrelevante Skalenvariablen $u_3, u_4, \ldots$ mit Eigenwerten $0 > y_3 > y_4 > \ldots$. Für u_t und u_h läßt sich in der Nähe des Fixpunktes der Renormierungsgruppe jeweils ein linearer Ansatz machen [4]

$$\begin{aligned} u_t &= \frac{\tilde{t}}{t_0}, \\ u_h &= \frac{H}{h_0}, \end{aligned} \tag{2.17}$$

wobei $\tilde{t}$ die reduzierte Temperatur (2.1) und t_0 sowie h_0 nicht-universelle Normierungskonstanten sind.
Das kritische Verhalten eines Systems leitet sich aus dem singulären Verhalten der freien Energiedichte f ab. Der singuläre Anteil f_s transformiert linear unter Renormierung

$$f_s(\mathbf{K}) = b^{-d} f_s(\mathbf{K}'). \tag{2.18}$$

Bei Vernachlässigung der irrelevanten Skalenvariablen ergibt sich in Abhängigkeit von u_t und u_h

$$f_s(u_t, u_h) = b^{-d} f_s(b^{y_t} u_t, b^{y_h} u_h). \tag{2.19}$$

Mit der speziellen Wahl von $b = |u_t|^{-1/y_t}$ läßt sich f_s schreiben als

$$f_s(u_t, u_h) = \left|\frac{\tilde{t}}{t_0}\right|^{\frac{d}{y_t}} \Phi^{\pm}\left(\frac{H/h_0}{|\tilde{t}/t_0|^{y_h/y_t}}\right), \tag{2.20}$$

wobei $\Phi^{\pm}$ eine universelle Skalenfunktion ist (Φ^+ für $\tilde{t} > 0$ und Φ^- für $\tilde{t} < 0$), d. h. für alle Systeme einer Universalitätsklasse gültig ist. Unterschiede innerhalb einer Klasse bestehen nur in unterschiedlichen Normierungskonstanten t_0 und h_0. Aus Gleichung (2.20) lassen sich nun die Potenzgesetze für die Observablen und die kritischen Exponenten ableiten, die schon in Kapitel 2.2 beschrieben wurden. Da sich für $\tilde{t} > 0$ und $\tilde{t} < 0$ die gleichen kritischen Exponenten ergeben und wir den Fall $\tilde{t} < 0$ betrachten wollen, wird im folgenden auf Φ^- Bezug genommen.
Entsprechend der Definition der Magnetisierung durch Ableitung der freien Energiedichte nach dem äußeren Feld ergibt sich

$$\begin{aligned} m &= -\left(\frac{\partial f}{\partial H}\right)_T \\ &= -\left|\frac{\tilde{t}}{t_0}\right|^{\frac{d}{y_t}} \frac{1}{h_0} \left|\frac{\tilde{t}}{t_0}\right|^{-\frac{y_h}{y_t}} \Phi^{-\prime}\left(\frac{H/h_0}{|\tilde{t}/t_0|^{y_h/y_t}}\right) \\ &= -\left|\frac{\tilde{t}}{t_0}\right|^{\frac{d-y_h}{y_t}} \frac{1}{h_0} \Phi^{-\prime}\left(\frac{H/h_0}{|\tilde{t}/t_0|^{y_h/y_t}}\right). \end{aligned} \tag{2.21}$$

Im Grenzfall $H \to 0^+$ ergibt sich somit

$$m = -\left|\frac{\tilde{t}}{t_0}\right|^{\frac{d-y_h}{y_t}} \frac{1}{h_0}\Phi^{-\prime}(0)\,. \tag{2.22}$$

Definiert man den Exponenten $\beta = \frac{d-y_h}{y_t}$ und läßt die konstanten Faktoren in die Normierung T_0 einfließen, so erhält man

$$m = (-t)^{\beta} \tag{2.23}$$

mit der normierten Temperatur t

$$t = \frac{T - T_c}{T_0}. \tag{2.24}$$

Entsprechendes Vorgehen für die Suszeptibilität liefert

$$\begin{aligned} \chi &= -\left(\frac{\partial^2 f}{\partial H^2}\right)\Big|_{H=0} \\ &\sim \left|\frac{\tilde{t}}{t_0}\right|^{\frac{d-2y_h}{y_t}} \\ &\sim |t|^{-\gamma} \end{aligned} \tag{2.25}$$

mit dem Exponenten $\gamma = \frac{2y_h - d}{y_t}$.
Für das Verhalten von m bei $\tilde{t} = 0$ und kleinem Feld $H > 0$ gehen wir wiederum von Gleichung (2.21) aus. Da für $t \to 0^-$ eine endliche Magnetisierung vorliegt, muß die Funktion $\Phi^{-\prime}(x)$ sich für große x verhalten wie $x^{d/y_h - 1}$. Daraus folgt für m mit einem konstanten Faktor c

$$\begin{aligned} m &= c\,H^{\frac{d}{y_h}-1} \\ &= h^{\frac{1}{\delta}} \end{aligned} \tag{2.26}$$

mit $\delta = \frac{y_h}{d-y_h}$ und $h = \frac{H}{H_0}$ mit einem Normierungsfaktor H_0.
Um das kritische Verhalten der Korrelationslänge für $H = 0$ im Spezialfall des von uns betrachteten Modells aus der Renormierungsgruppentheorie herzuleiten, gehen wir von der Korrelationsfunktion in Abhängigkeit der Parameter des Hamiltonoperators $\mathcal{H}$ aus

$$G(x-y, \mathcal{H}) = \langle \phi_x \phi_y \rangle_{\mathcal{H}} - \langle \phi_x \rangle_{\mathcal{H}} \langle \phi_y \rangle_{\mathcal{H}}\,. \tag{2.27}$$

Durch Hinzunahme eines lokalen Magnetfeldes h_i zum Hamiltonoperator, d. h. $\mathcal{H} \to \mathcal{H} - \sum_i h_i \phi_i$, erhält man G mittels Differentiation der freien Energiedichte nach h_x und h_y [4]

$$G(x-y, \mathcal{H}) = \frac{\partial^2}{\partial h_x \partial h_y} \ln Z\Big|_{h_i=0}\,. \tag{2.28}$$

Unter der Annahme, daß h_i lokal annähernd konstant ist und nur auf Längenskalen variiert, die viel größer als das Produkt aus Gitterkonstante a und Skalenfaktor b sind, transformiert der Hamiltonoperator unter Renormierung gemäß

$$\mathcal{H}(\phi) - \sum_i h_i \phi_i \;\rightarrow\; \mathcal{H}'(\phi') - \sum_{i'} h'_{i'} \phi'_{i'} \tag{2.29}$$

mit $h'_{i'} = b^{y_h} h_i$. Da die Zustandssumme invariant bleibt, gilt

$$\frac{\partial^2 \ln Z'(h')}{\partial h'_{x'} \partial h'_{y'}} \;=\; \frac{\partial^2 \ln Z(h)}{\partial h'_{x'} \partial h'_{y'}}. \tag{2.30}$$

Die linke Seite der Gleichung stellt die Korrelationsfunktion des renormierten Hamiltonoperators im Abstand $\frac{x-y}{b}$ dar. Die rechte Seite läßt sich schreiben als

$$b^{-2y_h} \left\langle \left(\phi_1^{x'} + \phi_2^{x'} + \ldots\right) \left(\phi_1^{y'} + \phi_2^{y'} + \ldots\right) \right\rangle_{\mathcal{H}}, \tag{2.31}$$

da eine infinitesimale Änderung des Feldes $\delta h'_{x'}$ z. B. im Block x' einer Änderung $\delta h_x = b^{-y_h} \delta h'_{x'}$ aller Einzelfelder im Block entspricht. Gleichung (2.31) läßt sich näherungsweise als Summe von b^{2d} identischen Zweipunkt-Korrelationsfunktionen schreiben, falls $|x-y| \gg b$ gilt. Somit folgt aus diesen Überlegungen das Transformationsverhalten von G

$$G\left(\frac{x-y}{b}, \mathcal{H}'\right) \;=\; b^{2(d-y_h)}\, G(x-y, \mathcal{H}). \tag{2.32}$$

Mit $r = |x-y|$ ergibt sich bei $H = 0$

$$G(r, \tilde{t}) \;=\; b^{-2(d-y_h)}\, G\left(\frac{r}{b}, b^{y_t} \tilde{t}\right) \tag{2.33}$$

und nach der Transformation mit der Normierung $b^{y_t}\tilde{t} = t_0$ schließlich

$$G(r, \tilde{t}) \;=\; \left|\frac{\tilde{t}}{t_0}\right|^{-2\frac{d-y_h}{y_t}} \mathcal{G}\left(\frac{r}{\left|\tilde{t}/t_0\right|^{-1/y_t}}\right) \tag{2.34}$$

mit einer weiteren universellen Skalenfunktion $\mathcal{G}$. Da G für große Abstände mit $e^{-r/\xi}$ abfällt, ergibt sich für die Korrelationslänge ξ das Verhalten

$$\xi \;\sim\; |t|^{-1/y_t} \;=\; |t|^{-\nu} \tag{2.35}$$

mit dem kritischen Exponenten $\nu = 1/y_t$. Am kritischen Punkt, d. h. für $t = 0$, folgt aus (2.33)

$$G(r) \;\sim\; r^{-2(d-y_h)} \;=\; \frac{1}{r^{d-2+\eta}} \tag{2.36}$$

mit $\eta = d + 2 - 2y_h$.

Die kritischen Exponenten sind über die beiden unabhängigen Eigenwerte y_t und y_h miteinander verknüpft, woraus sich die im vorigen Kapitel aufgeführten Skalengesetze (2.10) ergeben.

2.4 Corrections to Scaling

Bei der Herleitung der Skalenfunktionen und der Potenzgesetze im vorigen Kapitel sind nur die relevanten Skalenvariablen berücksichtigt worden, nicht aber die irrelevanten. Die gefundenen Zusammenhänge gelten nur im Grenzfall $t \to 0$ und $h \to 0$. In der Nähe des kritischen Punktes müssen im allgemeinen noch Korrekturen berücksichtigt werden, die sogenannten Corrections to Scaling.
Zum einen existieren nicht-analytische Korrekturen, welche aufgrund der Hinzunahme der irrelevanten Skalenvariablen auftreten. Der singuläre Anteil der freien Energiedichte erhält somit die Form

$$f_s(u_t, u_h, u_3, u_4, \ldots) \;=\; b^{-d} f_s\left(b^{y_t} u_t, b^{y_h} u_h, b^{y_3} u_3, b^{y_4} u_4, \ldots\right). \tag{2.37}$$

Wichtig für diese Arbeit ist insbesondere zur Bestimmung der Normierungskonstanten T_0 und H_0 das Verhalten der Magnetisierung. Betrachten wir daher die Magnetisierung für $h = 0$ und $t \lesssim 0$ und beschränken uns dabei auf die erste irrelevante Variable u_3. Es ergibt sich durch Entwicklung in u_3 mit den Normierungsbezeichnungen aus Gleichung (2.20) ein Korrekturterm zur freien Energiedichte [5]

$$f_s(u_t, u_h, u_3) \;=\; \left|\frac{\tilde{t}}{t_0}\right|^{\frac{d}{y_t}} \Phi\left(\frac{H/h_0}{|\tilde{t}/t_0|^{y_h/y_t}}\right) + \left|\frac{\tilde{t}}{t_0}\right|^{\frac{d-y_3}{y_t}} \Phi_3\left(\frac{H/h_0}{|\tilde{t}/t_0|^{y_h/y_t}}\right) + \ldots . \tag{2.38}$$

Leitet man hieraus entsprechend (2.21) wiederum die Magnetisierung für $t < 0$ ab, so erhält man

$$\begin{aligned} m &= (-t)^{\frac{d-y_h}{y_t}} + B_1(-t)^{\frac{d-y_h-y_3}{y_t}} + \ldots \\ &= (-t)^{\frac{d-y_h}{y_t}} \left(1 + B_1(-t)^{-\frac{y_3}{y_t}} + \ldots\right) \\ &= (-t)^{\beta}\left(1 + B_1(-t)^{\omega\nu} + \ldots\right) \end{aligned} \tag{2.39}$$

mit dem Exponenten $\omega = -y_3$ und der normierten Temperatur gemäß Gleichung (2.24). Bei größerem Abstand zum kritischen Punkt können noch analytische Korrekturen hinzukommen, da hier unsere lineare Approximation (2.17) der relevanten Skalenvariablen nicht mehr gilt. Diese Korrekturen treten in Gleichung (2.39) als ganzzahlige Potenzen in t auf. Wird die niedrigste Ordnung berücksichtigt, so ergibt sich für m

$$m \;=\; (-t)^{\beta}\left(1 + B_1(-t)^{\omega\nu} + B_2(-t)\right). \tag{2.40}$$

Das Potenzgesetz (2.26) muß ebenfalls bei Hinzunahme der ersten irrelevanten Skalenvariablen modifiziert werden. Für $t = 0$ folgt dann aus (2.37)

$$f_s(u_h, u_3) \;=\; u_h^{\frac{d}{y_h}} f_s\left(u_h^{-\frac{y_3}{y_h}} u_3\right). \tag{2.41}$$

Für die Magnetisierung $m = -\frac{\partial f_s}{\partial H}$ erhält man mit der Abkürzung $x = u_h^{-\frac{y_3}{y_h}} u_3$

$$m \;=\; c_1\, u_h^{\frac{d}{y_h}-1} f_s(x) \;+\; c_2\, u_h^{\frac{d-y_3}{y_h}-1} f_s'(x). \tag{2.42}$$

Verwendet man die Normierung aus (2.26) und faßt Terme, die von h^{-y_3/y_h} abhängen, in einer Funktion g zusammen, so folgt

$$\begin{aligned} m &= h^{\frac{d}{y_h}-1}\, g\left(h^{-\frac{y_3}{y_h}}\right) \\ &= h^{\frac{1}{\delta}}\, g\left(h^{\omega\nu_c}\right) \end{aligned} \tag{2.43}$$

mit dem Exponenten $\nu_c = 1/y_h$. Eine Entwicklung der Funktion g für kleine h in $h^{\omega\nu_c}$ liefert schließlich

$$m \;=\; h^{\frac{1}{\delta}}\left(1 + D_1 h^{\omega\nu_c}\right). \tag{2.44}$$

Wird auch hier noch die erste analytische Korrektur berücksichtigt, so ergibt sich

$$m \;=\; h^{\frac{1}{\delta}}\left(1 + D_1 h^{\omega\nu_c} + D_2 h\right). \tag{2.45}$$

Wie schon in Kapitel 1.2 geschildert, kann durch Einführung einer „Tuning“-Konstanten in der Wirkung versucht werden, den Einfluß der irrelevanten Skalenvariablen zu verringern. Dies kann wie in unserem Modell durch einen zusätzlichen Term $\lambda \sum_i \phi_i^4$ geschehen. Andere Möglichkeiten sind z. B. ein Spin-1-Modell mit den Spinwerten $s_i = -1, 0, 1$ und dem Term $D\sum_i s_i^2$ in der Wirkung oder das NNN-Modell mit einem Kopplungsterm zwischen raumdiagonal benachbarten Spins $\beta_2 \sum_{[i,j]} s_i s_j$. Die universellen Skaleneigenschaften sind bei den Modellen gleich, da all diese zur Ising-Universalitätsklasse gehören. Ob sich ein Wert für den jeweiligen Parameter finden läßt, bei dem die Amplituden B_1 und D_1 in den Gleichungen (2.40) und (2.45) vernachlässigbar klein sind, muß für die Modelle numerisch oder renormierungsgruppentheoretisch ermittelt werden. Allerdings ist nicht garantiert, daß sich beide Amplituden B_1 und D_1 gleichzeitig minimieren lassen. Im Idealfall des Verschwindens aller irrelevanten Skalenvariablen, d. h. in unserem Modell $u_i = 0$ für $i \geq 3$, kann man von einer perfekten Wirkung sprechen. Praktisch jedoch läßt sich nur eine verbesserte Wirkung mit minimierten Korrekturen erreichen.

2.5 Finite Size Scaling

Bei den bisherigen Überlegungen in den beiden vorhergehenden Kapiteln sind wir von einem unendlich großen Volumen ausgegangen. Da sich die numerischen Simulationen nur auf endliche Volumina beschränken können, müssen wir die endliche Gitterlänge L mit in unsere Betrachtungen einbeziehen. In Abhängigkeit von L erhält man dann Finite-Size-Skalenfunktionen, die im folgenden kurz hergeleitet werden.

Mit der dimensionslosen Größe l_0/L als zusätzlicher relevanter Skalenvariablen mit Eigenwert eins und l_0 als Referenzlänge ergibt sich für das Transformationsverhalten der freien Energiedichte

$$f_s\left(u_t, u_h, \frac{l_0}{L}\right) \;=\; b^{-d} f_s\left(b^{y_t} u_t, b^{y_h} u_h, b\frac{l_0}{L}\right). \tag{2.46}$$

Durch die spezielle Wahl von $b = L/l_0$ folgt somit

$$\begin{aligned} f_s\left(u_t, u_h, \frac{l_0}{L}\right) \;&=\; \left(\frac{L}{l_0}\right)^{-d} f_s\left(\left(\frac{L}{l_0}\right)^{y_t} u_t, \left(\frac{L}{l_0}\right)^{y_h} u_h\right) \\ &=\; L^{-d}\, Q\left(L^{\frac{1}{\nu}} t, L^{\frac{1}{\nu_c}} h\right) \end{aligned} \tag{2.47}$$

mit einer universellen Skalenfunktion Q, wobei die bekannten Normierungen der Temperatur und des Magnetfeldes sowie die kritischen Exponenten ν und ν_c verwendet wurden. Hieraus lassen sich wiederum Gesetzmäßigkeiten für die Observablen wie z. B. die Magnetisierung ableiten

$$m \;=\; L^{-\frac{\beta}{\nu}}\, Q_m\left(tL^{\frac{1}{\nu}}, hL^{\frac{1}{\nu_c}}\right). \tag{2.48}$$

Aus dem entsprechenden Transformationsverhalten der Korrelationslänge

$$\xi\left(u_t, u_h, \frac{l_0}{L}\right) \;=\; b\,\xi\left(b^{y_t} u_t, b^{y_h} u_h, b\frac{l_0}{L}\right) \tag{2.49}$$

folgt analog eine weitere Finite-Size-Skalenfunktion Q_ξ

$$\xi \;=\; L\, Q_\xi\left(tL^{\frac{1}{\nu}}, hL^{\frac{1}{\nu_c}}\right). \tag{2.50}$$

Kapitel 3

Zustandsgleichungen des Isingmodells

3.1 Zustandsgleichungen

Ein zentrales Ziel dieser Arbeit liegt in der numerischen Bestimmung der Zustandsgleichungen der Korrelationslänge und der Magnetisierung sowie der Suszeptibilität des dreidimensionalen Isingmodells. Daher sollen diese Zustandsgleichungen als weitere Skalenfunktionen, die aus der Renormierungsgruppentheorie abgeleitet werden können, in diesem gesonderten Kapitel behandelt werden. Durch sie wird ein Zusammenhang zwischen der Temperatur t, dem äußerem Feld h und der Korrelationslänge ξ bzw. zwischen t, h und der Magnetisierung m des Systems hergestellt.
Um die Skalenfunktion der Korrelationslänge zu bestimmen, gehen wir von dem Transformationsverhalten

$$\xi(u_t, u_h) \;=\; b\,\xi(b^{y_t}u_t, b^{y_h}u_h) \tag{3.1}$$

aus und wählen $b = u_h^{-1/y_h}$. Bedenken wir den linearen Ansatz $u_t \sim t$ und $u_h \sim h$, folgt somit

$$\xi(t,h) \;=\; h^{-1/y_h}\, g_\xi\Big(h^{-\frac{y_t}{y_h}}t\Big)\,. \tag{3.2}$$

Daraus ergibt sich mit den bekannten kritischen Exponenten für y_t und y_h das Skalenverhalten der Korrelationslänge

$$\begin{aligned} \xi h^{\nu_c} &= g_\xi\Big(th^{-\frac{1}{\beta\delta}}\Big) \\ &= g_\xi(z) \end{aligned} \tag{3.3}$$

mit der Definition

$$z \;\equiv\; t h^{-\frac{1}{\beta\delta}}. \tag{3.4}$$

Ein entsprechendes Vorgehen liefert die Zustandsgleichung der Magnetisierung. Betrachtet man für die freie Energiedichte den Ansatz

$$f_s(u_t, u_h) \;=\; b^{-d}\, f_s\left(b^{y_t} u_t, b^{y_h} u_h\right) \tag{3.5}$$

und wählt erneut $b = u_h^{-1/y_h}$, so erhält man

$$\begin{aligned} f_s(u_t, u_h) &= u_h^{\frac{d}{y_h}}\, f_s\Big(u_h^{-\frac{y_t}{y_h}} u_t\Big) \\ &= h^{\frac{d}{y_h}}\, \Psi\Big(h^{-\frac{y_t}{y_h}} t\Big) \\ &= h^{\frac{1}{\delta}+1}\, \Psi\Big(t h^{-\frac{1}{\beta\delta}}\Big) \\ &= h^{\frac{1}{\delta}+1}\, \Psi(z)\,. \end{aligned} \tag{3.6}$$

Berechnet man die Magnetisierung durch Differentiation der freien Energiedichte, so folgt

$$\begin{aligned} m &= -\frac{\partial f_s}{\partial H} \\ &= -\left[\left(\frac{1}{\delta}+1\right) h^{\frac{1}{\delta}} \frac{1}{H_0} \Psi(z) \;-\; h^{\frac{1}{\delta}+1} \frac{1}{\beta\delta} t h^{-\frac{1}{\beta\delta}-1} \frac{1}{H_0} \Psi'(z)\right] \\ &= h^{\frac{1}{\delta}} \frac{-1}{H_0 \beta\delta} \left[\beta(1+\delta)\Psi(z) \;-\; t h^{-\frac{1}{\beta\delta}} \Psi'(z)\right] \\ &= h^{\frac{1}{\delta}} \frac{-1}{H_0 \beta\delta} \left[d\nu \Psi(z) \;-\; z\Psi'(z)\right] \\ &= h^{\frac{1}{\delta}} f_G(z). \end{aligned} \tag{3.7}$$

Dieser Zusammenhang liefert die Zustandsgleichung der Magnetisierung

$$m h^{-\frac{1}{\delta}} \;=\; f_G(z). \tag{3.8}$$

Für den Spezialfall der kritischen Isotherme, d. h. $t = 0$ $(z = 0)$, sollte sich gemäß Gleichung (2.26) das Verhalten $m = h^{1/\delta}$ ergeben, so daß hieraus die Normierungsbedingung

$$f_G(0) \;=\; 1 \tag{3.9}$$

folgt. Da im Grenzfall verschwindenden Magnetfeldes $m = (-t)^\beta$ gilt, erhält man für f_G im Limes $z \to -\infty$

$$f_G(z) \;\overset{z\to-\infty}{\longrightarrow}\; (-z)^\beta. \tag{3.10}$$

Eine zu (3.8) äquivalente Form der Zustandsgleichung läßt sich herleiten, indem man von der Skalenrelation (2.21) ausgeht. Verwendet man die entsprechenden kritischen Exponenten und die normierten Größen t und h, so ergibt sich

$$m \;=\; c_1\, |t|^\beta\, \Phi^{-\prime}\big(c_2 h |t|^{-\beta\delta}\big) \tag{3.11}$$

mit konstanten Faktoren c_1 und c_2. Definiert man x als

$$x \equiv tm^{-\frac{1}{\beta}}, \tag{3.12}$$

so ist aufgrund von Gleichung (3.11) und der Definition (3.4) x eine Funktion von z

$$x = x(z). \tag{3.13}$$

Mit der Definition

$$y \equiv hm^{-\delta} \tag{3.14}$$

ist wegen der Zustandsgleichung (3.8) auch die Variable y eine Funktion von z. Durch Invertierung läßt sich z als Funktion von y darstellen

$$z = z(y). \tag{3.15}$$

Aus (3.13) und(3.15) folgt schließlich mittels erneuter Invertierung die Zustandsgleichung

$$y = f(x), \tag{3.16}$$

welche als Widom-Griffiths-Form bezeichnet wird. Aus $m(t=0) = h^{1/\delta}$ ergibt sich die Normierung

$$f(0) = 1 \tag{3.17}$$

und aus $m(h=0) = (-t)^\beta$

$$f(-1) = 0. \tag{3.18}$$

Diese Darstellungsweise der Zustandsgleichung geht auf Arbeiten von R. B. Griffiths [6] und B. Widom [7] zurück. Griffiths stellte hierbei für die Zustandsgleichung die Annahme

$$h(m,t) = m|m|^{\delta-1} f\left(t|m|^{-\frac{1}{\beta}}\right) \tag{3.19}$$

auf. Er folgerte, daß f im Bereich $-1 < x < \infty$ eine reelle, positive und analytische Funktion von x ist. Aufgrund dieser Analytizitätsbedingung läßt sich f für $x \to \infty$ als konvergente Reihe der Form

$$f(x) = \sum_{n=1}^{\infty} a_n x^{\beta(\delta+1-2n)} \tag{3.20}$$

darstellen.
Zuletzt betrachten wir noch die Zustandsgleichung der Suszeptibilität. Diese ergibt sich aus Differentiation der Magnetisierung nach dem äußeren Feld. Ausgehend von der Gleichung (3.7) folgt

$$\begin{aligned} \chi &= \frac{\partial m}{\partial H} \\ &= \frac{1}{\delta}\frac{1}{H_0} h^{\frac{1}{\delta}-1} f_G(z) - h^{\frac{1}{\delta}} \frac{1}{\beta\delta}\frac{1}{H_0} t h^{-\frac{1}{\beta\delta}-1} f_G'(z) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
&= \frac{1}{\delta}\frac{1}{H_0} h^{\frac{1}{\delta}-1} f_G(z) \;-\; h^{\frac{1}{\delta}-1}\frac{1}{\beta\delta}\frac{1}{H_0} z f_G'(z) \\
&= \frac{1}{H_0} h^{\frac{1}{\delta}-1}\frac{1}{\delta}\left[f_G(z) \;-\; \frac{z}{\beta} f_G'(z)\right] \\
&= \frac{1}{H_0} h^{\frac{1}{\delta}-1} f_\chi(z) \qquad (3.21)
\end{aligned}$$

mit der Zustandsgleichung $f_\chi(z)$.
Es sei noch betont, daß die Skalenfunktionen $g_\xi(z)$, $f_G(z)$ bzw. $f(x)$ und $f_\chi(z)$ mit den oben gewählten Normierungen wiederum universell, d. h. für alle Modelle der Ising-Klasse gleich sind.

3.2 Feldtheoretische Methoden

Die universellen Größen (kritische Exponenten, Zustandsgleichungen) von Modellen mit einem kontinuierlichen Phasenübergang lassen sich nicht nur per direkter Messung im Experiment oder wie in dieser Arbeit über Monte-Carlo-Simulationen bestimmen. Man kann sie auch über feldtheoretische Methoden, von denen einige hier kurz vorgestellt werden sollen, berechnen. Für genauere Betrachtungen sei auf Ref. [8] verwiesen.
Der Ausgangspunkt für die Berechnungen ist im Fall von O(N)-Spinmodellen die O(N)-symmetrische ϕ^4-Feldtheorie. Beschränken wir uns auf das Isingmodell, also auf $N = 1$, so ist die Wirkung gegeben durch

$$\mathcal{H}(\phi) \;=\; \int \mathrm{d}^d x \left\{\frac{1}{2}\left(\partial_\mu \phi(x)\right)^2 \;+\; \frac{1}{2} r \phi^2(x) \;+\; \frac{1}{4!} g_0 \Lambda^{4-d} \phi^4(x)\right\}, \qquad (3.22)$$

wobei der Parameter r die Temperatur repräsentiert. In der bei Impuls Null renormierten Theorie besitzt die freie Energiedichte $\mathcal{F}$ eine Entwicklung in der renormierten Magnetisierung φ der Form

$$\mathcal{F}(\varphi) \;=\; \mathcal{F}(0) + \frac{1}{2} M^2 \varphi^2 + \frac{1}{4!} M g \varphi^4 + O(\varphi^6), \qquad (3.23)$$

wobei M ein Masseparameter und g die renormierte dimensionslose Kopplungskonstante ist.
Über die freie Energiedichte definiert sich das reduzierte effektive Potential $\mathcal{V}$

$$\mathcal{V}(\tilde{z}, g) \;=\; \frac{g}{M^d}\left(\mathcal{F}(\varphi) - \mathcal{F}(0)\right) \qquad (3.24)$$

mit einer reskalierten Variablen $\tilde{z}$

$$\tilde{z} \;=\; \varphi g^{\frac{1}{2}} M^{\frac{2-d}{2}}. \qquad (3.25)$$

Mit $g = g^*$ als dem Fixpunktwert der Kopplung gilt für $\tilde{z}$

$$\tilde{z} \sim mt^{-\beta} = x^{-\beta}. \tag{3.26}$$

Hierauf aufbauend existieren einige feldtheoretische Methoden, von denen zwei hier in kurzen Stichpunkten vorgestellt werden sollen.
Eine von K. G. Wilson und M. E. Fisher eingeführte Methode ist die sogenannte ε-Entwicklung. Hierbei wird die Dimension d des Systems als kontinuierliche Variable betrachtet. Setzt man $d = 4 - \varepsilon$, so lassen sich Reihenentwicklungen in den Parametern g und ε machen. Es stellt sich heraus, daß diese Reihen für alle Werte der Entwicklungsparameter nicht konvergieren, deshalb bedarf es weiterer Methoden, wie z. B. der Borel-Summation, diese divergenten Reihen zu behandeln.
Die ε-Entwicklung für die Zustandsgleichung $f(x)$ der Magnetisierung ist bis zur Ordnung ε^3 bekannt [9]

$$f(x) \;=\; 1 \,+\, x \,+\, \varepsilon f_1(x) \,+\, \varepsilon^2 f_2(x) \,+\, \varepsilon^3 f_3(x) \,+\, O(\varepsilon^4) \tag{3.27}$$

mit

$$\begin{aligned}
f_1(x) &= \frac{1}{6}(x+3)\mathrm{Ln} \\
f_2(x) &= \frac{1}{72}(x+9)\mathrm{Ln}^2 + \frac{25}{324}(x+3)\mathrm{Ln} \\
f_3(x) &= \frac{\mathrm{Ln}^3(27+x)}{1296} + \frac{\mathrm{Ln}^2(675+246x+25x^2)}{1944(3+x)} \\
&\quad + \frac{\mathrm{Ln}(1617+701x-1296x\zeta(3))}{17496} + \frac{x^2(-1-2\mu+4\zeta(3))}{108(3+x)}
\end{aligned} \tag{3.28}$$

und der Abkürzung

$$\mathrm{Ln} \;=\; \ln(x+3), \tag{3.29}$$

wobei $\mu = 1.17195361934\ldots$ eine Konstante ist und ζ für die Riemannsche ζ-Funktion steht. Allerdings ist diese Entwicklung nicht gültig für große x, d. h. für kleine Magnetisierungen. In diesem Bereich kann die Zustandsgleichung aus der Ableitung F des reduzierten effektiven Potentials $\mathcal{V}$ nach der Variablen $\tilde{z}$ erhalten werden (vgl. [9])

$$F(\tilde{z}, g) \;=\; \frac{\partial \mathcal{V}(\tilde{z}, g)}{\partial \tilde{z}}. \tag{3.30}$$

Die Zustandsgleichung ist mit $F(\tilde{z}) = F(\tilde{z}, g^*)$ über die Beziehung

$$h \;\sim\; t^{\beta\delta}\, F(\tilde{z}) \tag{3.31}$$

verknüpft. F besitzt in $\tilde{z}$ die Entwicklung

$$F(\tilde{z}) \;=\; \tilde{z} \,+\, \frac{1}{6}\tilde{z}^3 \,+\, \sum_{l=2} F_{2l+1}\tilde{z}^{2l+1}. \tag{3.32}$$

In ε entwickelt erhält man bis zur Ordnung ε^3

$$F(\tilde{z}) \;=\; \tilde{F}_0(\tilde{z}) \,+\, \varepsilon \tilde{F}_1(\tilde{z}) \,+\, \varepsilon^2 \tilde{F}_2(\tilde{z}) \,+\, \varepsilon^3 \tilde{F}_3(\tilde{z}) \tag{3.33}$$

mit

$$\begin{aligned}
\tilde{F}_0 &= \tilde{z} + \frac{1}{6}\tilde{z}^3 \\
\tilde{F}_1 &= \frac{1}{12}\left(-\tilde{z}^3 + \widetilde{\mathrm{Ln}}(2\tilde{z} + \tilde{z}^3)\right) \\
\tilde{F}_2 &= \frac{1}{1296}\left(-50\tilde{z}^3 + \widetilde{\mathrm{Ln}}(100\tilde{z} - 4\tilde{z}^3) + \widetilde{\mathrm{Ln}}^2(18\tilde{z} + 27\tilde{z}^3)\right) \\
\tilde{F}_3 &= \frac{1}{69984(2+\tilde{z}^2)}\Big[\widetilde{\mathrm{Ln}}^3(108\tilde{z} + 540\tilde{z}^3 + 243\tilde{z}^5) \\
&\quad + \widetilde{\mathrm{Ln}}^2(1800\tilde{z} + 1494\tilde{z}^3 + 621\tilde{z}^5) \\
&\quad + \widetilde{\mathrm{Ln}}\left(-1622\tilde{z}^5 + \tilde{z}^3(1504 - 5184\zeta(3)) + \tilde{z}(5608 - 10368\zeta(3))\right) \\
&\quad + \tilde{z}^5(-997 - 648\mu + 3888\zeta(3)) + \tilde{z}^3(-2804 + 5184\zeta(3))\Big]
\end{aligned} \tag{3.34}$$

und

$$\widetilde{\mathrm{Ln}} \;=\; \ln\left(1 + \frac{\tilde{z}^2}{2}\right). \tag{3.35}$$

Während der Gültigkeitsbereich der beiden Entwicklungen (3.27) und (3.33) im Rahmen der formalen ε-Entwicklung überlappt, lassen diese sich für den Fall $d = 3$, d. h. $\varepsilon = 1$, an welchem wir interessiert sind, nicht aneinander anpassen. Das Problem kann umgangen werden, indem man eine spezielle Parametrisierung der Zustandsgleichung einführt. Diese wird im folgenden Kapitel näher beschrieben.
Zunächst sei aber noch kurz eine weitere feldtheoretische Methode neben der ε-Entwicklung erwähnt, universelle Größen zu bestimmen. Hierbei handelt es sich um eine Störungsreihenentwicklung im Kopplungsparameter bei fester Dimension. Die Zustandsgleichung läßt sich dann in der Form

$$h \;=\; c\,t^{\beta\delta} F(mt^{-\beta}, g^*) \tag{3.36}$$

mit einer Konstanten c schreiben, wobei man für die Funktion $F(\tilde{z}, g)$

$$F(\tilde{z}, g) \;=\; \tilde{z} + \frac{1}{6}\tilde{z}^3 + \frac{1}{256\pi} g\tilde{z}^5 - \frac{1}{2^{13}\pi} g\tilde{z}^7 + O\left(\tilde{z}^9\right) \tag{3.37}$$

erhält. Diese Entwicklung ist wiederum nur in der symmetrischen Phase ($t > 0$; $\tilde{z}$ klein) zu verwenden. Den Übergang zu $t < 0$ in die gebrochene Phase versucht man durch analytische Fortsetzung in der komplexen t-Ebene. Jedoch zeigt sich, daß auch diese Methode nicht die Extrapolation der Zustandsgleichung für kleine t erlaubt.
Deshalb liegt auch hier der Ansatz der oben genannten Parametrisierung nahe, der nun besprochen werden soll.

3.3 Parametrisierung der Zustandsgleichung

Eine Darstellungsweise der Zustandsgleichung (3.16), welche mit feldtheoretischem Zugang sowohl in der symmetrischen als auch in der gebrochenen Phase gültig ist, geht auf Arbeiten von Schofield [10] [11] und Josephson [12] zurück. In der Josephson-Schofield-Parametrisierung werden die Größen m, t und h durch die zwei neuen Parameter R und θ dargestellt. Man setzt

$$\begin{aligned} m &= R^\beta\,\bar{m}(\theta), \\ t &= R\,\bar{t}(\theta), \\ h &= R^{\beta\delta}\,\bar{h}(\theta). \end{aligned} \tag{3.38}$$

Der Parameter R repräsentiert eine Art Abstand vom kritischen Punkt und θ einen Abstand entlang Kurven mit konstantem R. Die drei Funktionen $\bar{m}(\theta)$, $\bar{t}(\theta)$ und $\bar{h}(\theta)$ hängen voneinander ab. Jedoch lassen sich die Funktionen derart wählen, daß $\bar{m}(\theta)$ linear in θ ist. In diesem sogenannten linearen Modell sehen die Parametrisierungen wie folgt aus:

$$\begin{aligned} m &= m_0\,R^\beta\,\theta, \\ t &= R\left(1-\theta^2\right), \\ h &= h_0\,R^{\beta\delta}\,\hat{h}(\theta) \end{aligned} \tag{3.39}$$

mit Normierungskonstanten m_0 und h_0 und einer noch zu bestimmenden Funktion $\hat{h}(\theta)$, die eine ungerade Funktion von θ ist und aufgrund der Analytizitätsbedingung von Griffiths regulär in der Nähe von $\theta = 1$ $(t = 0)$ sowie in der Nähe von $\theta = 0$ ist. Für $\theta = \theta_0$ verschwindet die Funktion, was der Koexistenzlinie $(h = 0,\ t < 0)$ entspricht (vgl. Abbildung 3.1).

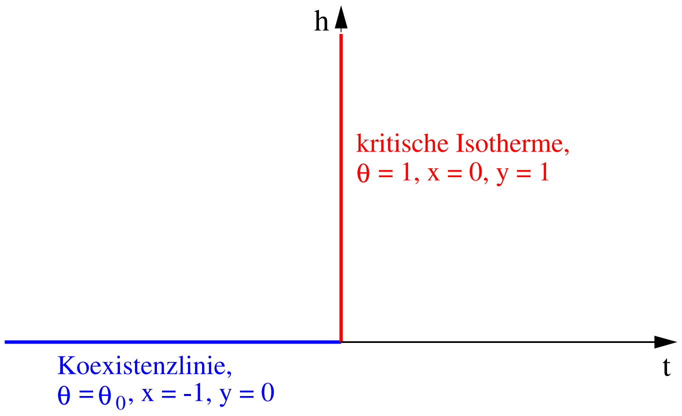

Abbildung 3.1: Phasendiagramm.

Ausgedrückt durch die Parameter R und θ ergibt sich für die Skalenvariablen x und y aus den Gleichungen (3.12) und (3.14) sowie für $\tilde{z}$ aus Gleichung (3.26)

$$\begin{aligned} x &= m_0^{-\frac{1}{\beta}} \left(1-\theta^2\right) \theta^{-\frac{1}{\beta}}, \\ y &= h_0\, m_0^{-\delta}\, \theta^{-\delta}\, \hat{h}(\theta), \\ \tilde{z} &= \rho\,\theta \left(1-\theta^2\right)^{-\beta} \end{aligned} \tag{3.40}$$

mit einer positiven Konstanten ρ.
Die Konstanten m_0 und h_0 sind festgelegt durch die Normierungsbedingungen (3.17) und (3.18). Aus $f(-1)=0$ folgt für m_0

$$\begin{aligned} -1 &= m_0^{-\frac{1}{\beta}} \left(1-\theta_0^2\right) \theta_0^{-\frac{1}{\beta}} \\ \Leftrightarrow\ m_0 &= \frac{\left(\theta_0^2-1\right)^\beta}{\theta_0}, \end{aligned} \tag{3.41}$$

und aus $f(0)=1$ folgt für h_0

$$\begin{aligned} 1 &= h_0 m_0^{-\delta} \hat{h}(1) \\ \Leftrightarrow\ h_0 &= \frac{m_0^\delta}{\hat{h}(1)}. \end{aligned} \tag{3.42}$$

Damit ergibt sich eine in der Variablen θ parametrisierte und normierte Darstellung der Widom-Griffiths-Zustandsgleichung

$$\begin{aligned} f(x) &= \frac{\hat{h}(\theta)}{\hat{h}(1)\,\theta^\delta}, \\ x &= \frac{1-\theta^2}{\theta_0^2-1} \left(\frac{\theta_0}{\theta}\right)^{\frac{1}{\beta}}. \end{aligned} \tag{3.43}$$

Den Zusammenhang der Entwicklungskoeffizienten $F_5, F_7, \ldots$ von $F(\tilde{z})$ in Gleichung (3.32) mit einer Entwicklung von $\hat{h}(\theta)$ in θ erhält man über die Beziehung

$$\hat{h}(\theta) = \theta \left[1 + \sum_{l=1} \hat{h}_{2l+1} \theta^{2l}\right] \tag{3.44}$$

mit den ersten drei Koeffizienten [9]

$$\begin{aligned} \hat{h}_3 &= \frac{1}{6}\rho^2 - \gamma \\ \hat{h}_5 &= \frac{1}{2}\gamma(\gamma-1) + \frac{1}{6}(2\beta-\gamma)\rho^2 + F_5\rho^4 \\ \hat{h}_7 &= \frac{1}{6}\gamma(\gamma-1)(\gamma-2) + \frac{1}{12}(2\beta-\gamma)(2\beta-\gamma+1)\rho^2 \\ &\quad + (4\beta-\gamma)F_5\rho^4 + F_7\rho^6, \end{aligned} \tag{3.45}$$

wobei β und γ die schon bekannten kritischen Exponenten sind.
In der ε-Entwicklung ergibt sich für $\hat{h}(\theta)$ bis zur Ordnung ε^2 bei geeigneter Wahl von ρ

$$\hat{h}(\theta) \;=\; \theta\left[1-\frac{2}{3}\theta^2\right]+O(\varepsilon^2). \tag{3.46}$$

Berücksichtigt man noch eine weitere Ordnung in ε, so erhält man

$$\hat{h}(\theta) \;=\; \theta\left[1+\hat{h}_3\theta^2+\hat{h}_5\theta^4\right]+O(\varepsilon^4) \tag{3.47}$$

mit

$$\begin{aligned}\hat{h}_3 &= -\frac{2}{3}\left(1+\frac{\varepsilon^2}{12}\right)\\ \hat{h}_5 &= \frac{\varepsilon^3}{27}\left(\zeta(3)-\frac{1}{2}\mu-\frac{1}{4}\right)\end{aligned} \tag{3.48}$$

und der Konstanten μ aus den Gleichungen (3.28).
Bedient man sich bei der Bestimmung von F statt der ε-Entwicklung der Störungsentwicklung bei fester Dimension $d=3$, so ist die daraus resultierende Funktion $\hat{h}(\theta)$ bei $\theta=1$ nicht regulär. Um Regularität zu erhalten, entwickelt man die Näherung für $\hat{h}(\theta)$ um $\theta=0$ und bricht die Reihe bei der Ordnung ab, bis zu welcher man die Funktion F bestimmt hat. Der letzte Term der $\hat{h}$-Entwicklung kann mit Hilfe des bisher beliebigen Parameters ρ minimiert werden, so daß die kleineren Potenzen höher gewichtet werden und die Summe schneller konvergiert. Diese Vorgehensweise ist eine Anwendung der sogenannten „Order dependent mapping"-Methode [9]. Als erste Approximation ergibt sich ein Polynom fünften Grades

$$\hat{h}(\theta) \;=\; \theta\left[1+\hat{h}_3(\rho)\theta^2+\hat{h}_5(\rho)\theta^4\right] \tag{3.49}$$

mit einem Minimum für h_5 bei

$$\rho^2 \;=\; \frac{1}{12F_5}(\gamma-2\beta). \tag{3.50}$$

In der nächsten Ordnung wird entsprechend der Koeffizient $\hat{h}_7$ minimiert.
Der Vergleich der Ergebnisse beider Methoden gibt Aufschluß über die Genauigkeit und kann zur Abschätzung eines Fehlers herangezogen werden.

Kapitel 4

Numerische Methoden

4.1 Monte-Carlo-Simulationen

Wie schon in Kapitel 1.3 erwähnt, ist der Erwartungswert einer Observablen O gegeben durch die Gleichung (1.9), die sich auch schreiben läßt als

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

mit der Gibbs-Verteilung

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

Bei Computersimulationen ist es im allgemeinen unmöglich, die Integrale in (4.1) direkt zu berechnen. Selbst im Falle von diskreten Zuständen, wie beim Isingmodell mit den Spineinstellungen „up“ und „down“, gelingt die endliche Summation über alle Zustände auch bei relativ kleinen Volumina nicht mehr.
Deshalb greift man auf die Methode der Monte-Carlo-Simulation zurück. Hierbei wird der Erwartungswert $\langle O \rangle$ durch eine endliche Anzahl von zufällig erzeugten Konfigurationen abgeschätzt. Werden die Zustände gleichverteilt erzeugt, so spricht man von „Simple sampling“. Ein entscheidender Nachteil besteht allerdings in der Erzeugung vieler Zustände, welche aufgrund des Boltzmann-Faktors $e^{-\beta \mathcal{H}}$ kaum zum Gewicht der Zustandssumme beitragen. Insbesondere trägt bei wachsender Gittergröße ein immer kleinerer Anteil der Zustände wesentlich zum Gewicht bei.
Die Lösung dieses Problems liefert das „Importance sampling“, bei welchem die

Konfigurationen mit ihrem relativen Gewicht, d. h. mit der Gibbs-Verteilung (4.2), erzeugt werden. Eine Schätzung für die Erwartungswerte liefert dann die Gleichung

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

wobei N die Anzahl der verwendeten Konfigurationen ist. Jedoch ergibt sich hier die Schwierigkeit, daß die Zustandssumme in der gewünschten Verteilung (4.2) nicht bekannt ist. Abhilfe schafft bei diesem Problem ein stochastischer Prozeß, bei dem nur Verhältnisse von Wahrscheinlichkeiten nötig sind, d. h. Ausdrücke der Form

$$\frac{P(\sigma_i)}{P(\sigma_j)} \;=\; \frac{e^{-\beta\mathcal{H}(\sigma_i)}}{e^{-\beta\mathcal{H}(\sigma_j)}}, \tag{4.4}$$

bei denen der Faktor Z herausfällt.
Eine sogenannte Markovkette ist ein solcher Prozeß. Eine Markovkette ist dadurch charakterisiert, daß ausgehend von einem Zustand σ_i ein neuer Zustand σ_j erzeugt wird, der nur von σ_i, also seinem direkten Vorgänger abhängig ist. Sei $p(\sigma_j, \sigma_i)$ die Übergangswahrscheinlichkeit von σ_i nach σ_j. Bezeichnen wir mit t eine Monte-Carlo-Zeit, die ausgehend von einer Anfangskonfiguration bei $t = 0$ die mittels der Markovkette nachfolgend generierten Zustände abzählt, so konvergiert im Limes großer Zeiten die Verteilung unter folgenden Bedingungen gegen die Gibbs-Verteilung:

- Normierung:
  Jeder Zustand besitzt genau einen Nachfolgezustand, es gilt somit
  $$\sum_j p(\sigma_j, \sigma_i) \;=\; 1. \tag{4.5}$$

- Ergodizität:
  Jeder Zustand kann in endlicher Zeit erreicht werden, d. h., es muß
  $$p(\sigma_j, \sigma_i) \;>\; 0 \tag{4.6}$$
  gelten.

- Detailed Balance:
  Es muß eine Mikroreversibilität der Form
  $$P(\sigma_i)\, p(\sigma_j, \sigma_i) \;=\; P(\sigma_j)\, p(\sigma_i, \sigma_j) \tag{4.7}$$
  erfüllt sein.

Die Zeit, welche zum Erreichen der Gibbs-Verteilung benötigt wird, bezeichnet man als Thermalisierung. Die Anzahl der Thermalisierungsschritte hängt von der Anfangskonfiguration ab.
Es existieren verschiedene Methoden, einen Markov-Prozeß zu realisieren. Zwei solcher Algorithmen, welche in dieser Arbeit benutzt wurden, sollen nun vorgestellt werden.

4.2 Metropolis-Algorithmus

Der nach N. Metropolis benannte Algorithmus ist ein einfacher und allgemein einsetzbarer Algorithmus. Die Übergangswahrscheinlichkeit wird hierbei in zwei Teile aufgespalten, in eine Vorschlags- (p_{trial}) und eine Akzeptanzwahrscheinlichkeit (p_{accept})

$$p(\sigma_j, \sigma_i) \;=\; p_{trial}(\sigma_j, \sigma_i)\, p_{accept}(\sigma_j, \sigma_i). \tag{4.8}$$

Mit $p_{trial}(\sigma_j, \sigma_i)$ wird ein neuer Zustand σ_j ausgehend von σ_i vorgeschlagen. Die spezielle Wahl ist prinzipiell beliebig, sollte jedoch symmetrisch unter Vertauschung von i und j sein, um Detailed Balance zu gewährleisten. Der Vorschlag wird dann mit der Wahrscheinlichkeit

$$p_{accept}(\sigma_j, \sigma_i) \;=\; \min\left[1, e^{-\beta(\mathcal{H}(\sigma_j)-\mathcal{H}(\sigma_i))}\right] \tag{4.9}$$

angenommen. Sonst verbleibt das System im alten Zustand. Im Falle von Spinmodellen wird in einem Metropolisschritt nur ein einzelner Spin betrachtet, der Update ist somit lokal. Um die Ergodizität des Prozesses zu erfüllen, müssen mehrere solcher elementaren Schritte hintereinander ausgeführt werden, so daß insgesamt ein globaler Update entsteht. Dies kann durch zufällige Wahl der Gitterpunkte geschehen, in der Regel wird jedoch ein geordneter Durchgang durch das gesamte Gitter ausgeführt, man spricht von einem Sweep.
Angewendet auf das Standard-Isingmodell wird der Metropolis-Algorithmus benutzt, um die Richtung der Spins umzukippen („Spinflip“). In dieser Arbeit wird er dazu verwendet, um die kontinuierlichen Längen der Spins zu ändern. Ein neuer Vorschlag ϕ'_x für einen Spin ϕ_x kann im Rahmen des Metropolis-Updates zum Beispiel durch die Vorschrift

$$\phi'_x \;=\; \phi_x + s\left(r - \frac{1}{2}\right) \tag{4.10}$$

erfolgen, wobei r eine im Intervall [0,1) gleichverteilte Zufallszahl und s ein beliebiger reeller Parameter ist, mit dessen Hilfe sich die Akzeptanzwahrscheinlichkeit des Vorschlags abstimmen läßt [13]. In der Praxis sollte die Akzeptanzrate nicht zu gering sein, da sonst zu viele Vorschläge verworfen werden. Höhere Akzeptanzwahrscheinlichkeiten können durch Vorschläge erreicht werden, die sich nur wenig von dem vorherigen Zustand unterscheiden. Jedoch verbleibt dann das System lange in lokalen Minima der Wirkung, und die statistischen Korrelationen zwischen den Konfigurationen sind sehr groß. Akzeptanzraten von ca. 50 % erweisen sich bei Monte-Carlo-Simulationen als sinnvoll.
Statt ϕ'_x gleichverteilt um ϕ_x vorzuschlagen, läßt sich ϕ'_x auch mit anderen Verteilungen wählen, wie z. B. mit einer Gaußverteilung oder mittels Importance sampling.
Die gerade erwähnten statistischen Korrelationen lassen sich, unabhängig vom verwendeten Algorithmus, über die integrierte Autokorrelationszeit τ_{int} messen. Diese

ist ein Maß für die Abhängigkeit der einzelnen Konfigurationen voneinander. Liegen N abhängige Messungen mit τ_{int} vor, so entspricht dies einer Anzahl von $N/(2\tau_{int})$ unabhängigen Datensätzen. Für eine genaue Definition und ausführliche Diskussion der Autokorrelationszeit sei auf Ref. [1] verwiesen. Es stellt sich heraus, daß τ_{int} bei Annäherung an den kritischen Punkt gemäß

$$\tau_{int} \sim \xi^z \tag{4.11}$$

anwächst. Der Exponent z ist dabei vom verwendeten Algorithmus abhängig, für den Metropolis-Update findet man $z \approx 2$. Dieser Effekt wird als „Critical slowing down" bezeichnet. Um die Auswirkungen des Critical slowing downs zu vermindern oder zu unterbinden, sind Algorithmen mit kleinem z bzw. $z \approx 0$ wünschenswert. Der im folgenden Kapitel beschriebene Wolff-Cluster-Algorithmus stellt mit $z \approx 0$ eine geeignete Methode dar.

4.3 Wolff-Cluster-Algorithmus

Der Cluster-Algorithmus geht auf Arbeiten von R. H. Swendsen und J. Wang zurück [14]. Die Idee bei dieser Methode beruht auf der Ausbildung von lokal geordneten Gebieten bei Spinmodellen. Die Spins in solch einem zusammenhängenden Gebiet, einem sogenannten Cluster, sind dabei in einem ihrer Freiheitsgrade alle ungefähr gleich ausgerichtet. Im Isingmodell existiert mit dem Vorzeichen der Spinvariablen s_x nur ein Freiheitsgrad. Ein Cluster, welcher z. B. durch die Richtung „up" gekennzeichnet ist, unterliegt bei einem einzelnen Update des Systems einem Spinflip, so daß alle seine Spins ihre Ausrichtung in „down" wechseln. Damit ändert sich die Energie des Systems nur wenig, aber die neue Konfiguration unterscheidet sich merklich von der vorherigen, womit statistische Korrelationen verringert werden. Der Cluster-Algorithmus ist im Gegensatz zum Metropolis-Algorithmus somit eine globale Update-Vorschrift.
Eine spezielle Variante für einen Single-Cluster-Algorithmus wurde von U. Wolff vorgeschlagen [15]. Sein Verfahren für allgemeine O(N)-symmetrische nicht-lineare σ-Modelle wird z. B. in Ref. [1] beschrieben. Wir wenden den Wolff-Cluster-Algorithmus hier im Spezialfall des Isingmodells mit verbesserter Wirkung an. Als ausgezeichneten Freiheitsgrad betrachten wir das Vorzeichen der Spins ϕ_x, die Spinlängen werden dabei außer acht gelassen. Die Durchführung eines Wolff-Cluster-Updates geschieht dann wie folgt:

- Ein beliebiger Gitterplatz x wird als Ursprung des zu bildenden Clusters zufällig gewählt.

- Die nächsten Nachbarspins $\phi_{x+\hat{\mu}}$ um ϕ_x werden betrachtet und mit der Wahrscheinlichkeit
$$p(\phi_x, \phi_{x+\hat{\mu}}) \;=\; 1 - e^{\min\left\{0,-2J\phi_x\phi_{x+\hat{\mu}}\right\}} \tag{4.12}$$
in den Cluster aufgenommen.

- Von allen neu hinzugenommenen Spins werden wiederum die nächsten Nachbarn gemäß des vorigen Schrittes betrachtet, wobei jeder schon getestete Spin nicht mehr berücksichtigt wird.

- Wird kein weiterer Spin in den Cluster aufgenommen, wird jede Variable ϕ_i des Clusters ersetzt durch $\phi_i' = -\phi_i$.

Hierbei vernachlässigt man allerdings ein äußeres Feld, welches in unserem untersuchten Modell mit der Wirkung (1.2) jedoch vorhanden ist. Um dieses in den Update mit einzubeziehen, führen wir einen sogenannten Ghostspin ϕ_{Ghost} ein, der in dem oben beschriebenen Verfahren gleichberechtigt zu den anderen Spins ist, jedoch mit der Stärke H an diese koppelt und nächster Nachbar von allen Spins ist. Der Ghostspin wird somit statt mit der Wahrscheinlichkeit (4.12) mit

$$p(\phi_x, \phi_{Ghost}) \;=\; 1 - e^{\min\{0,-2H\phi_x\phi_{Ghost}\}} \tag{4.13}$$

in den Cluster aufgenommen.
Damit der Update im Fall der verbesserten Wirkung ergodisch wird, muß zusätzlich zum Wolff-Cluster-Algorithmus ein weiterer Algorithmus durchgeführt werden, welcher die Spinlängen ändert. Dies kann, der Idee von R. C. Brower und P. Tamayo folgend [16], durch Kombination mit der Metropolis-Methode geschehen.

4.4 Jackknife-Fehleranalyse

Liegen für eine Observable O n unabhängige Meßwerte O_i $(i = 1, \ldots, n)$ vor, so kann deren Erwartungswert durch den Mittelwert $\bar{O}$ gemäß der Gleichung

$$\bar{O} \;=\; \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n} O_i \tag{4.14}$$

abgeschätzt werden. Eine Schätzung für die Varianz des Mittelwertes der Stichprobe ist

$$\sigma^2(\bar{O}) \;=\; \frac{1}{n(n-1)}\sum_{i=1}^{n}\left(O_i - \bar{O}\right)^2 . \tag{4.15}$$

Da jedoch Monte-Carlo-Simulationen im allgemeinen abhängige Daten liefern, bietet sich zur Schätzung der Erwartungswerte und der Fehler die sogenannte Jackknife-Methode an, die die Korrelationen der Meßwerte berücksichtigt. Insbesondere kann mittels des Jackknife versucht werden, einen Fehler für eine Observable anzugeben, wenn keine andere sinnvolle Definition möglich ist.
Zur Fehleranalyse wird ein Datensatz in N Untersätze mit dem jeweiligen Umfang m aufgespalten ($n = Nm$). Hieraus bildet man N Stichproben durch Weglassen des i-ten Satzes aus der Gesamtstichprobe mit Mittelwerten T_i ($i = 1, \ldots, N$). Damit sind die Pseudowerte des Jackknife J_i definiert als

$$J_i \;=\; NT \;-\; (N-1)T_i, \tag{4.16}$$

wobei der Mittelwert T auf den gesamten Daten basiert. Ist die Autokorrelationszeit kleiner als die Länge m einer Teilstichprobe und ist die Anzahl N ausreichend groß, so können die Pseudowerte J_i als unabhängig angesehen werden, und Gleichung (4.14) liefert eine Schätzung des Erwartungswertes mittels

$$J \;=\; \frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N} J_i. \tag{4.17}$$

Die Differenz $B = T - J$ gibt die Verzerrung, den sogenannten Bias, an. Die Varianz der Jackknife-Schätzung ergibt sich gemäß Gleichung (4.15) als

$$\sigma^2(J) \;=\; \frac{1}{N(N-1)}\sum_{i=1}^{N}\left(J_i - J\right)^2. \tag{4.18}$$

Kapitel 5

Numerische Resultate für das Isingmodell

5.1 Simulationsparameter

Die Monte-Carlo-Computersimulationen des Isingmodells mit der verbesserten Wirkung (1.2) wurden auf DEC-Alpha-Workstations in Bielefeld durchgeführt. Dabei wurde ein dreidimensionales kubisches Gitter mit periodischen Randbedingungen benutzt. Die Kantenlänge L des Gitters wurde zwischen $L = 24$ und $L = 120$ variiert. Das verwendete Fortran-90-Programm basiert auf einem Programm zur Simulation des dreidimensionalen O(2)-Spinmodells, welches in Ref. [18] und [19] benutzt wurde.
Zur Minimierung der Corrections to Scaling mußte der Parameter λ der Wirkung entsprechend gewählt werden. Die Bestimmung des optimalen Wertes ist jedoch nicht Gegenstand dieser Arbeit, sondern wurde bereits von Ballesteros et al. sowie von Hasenbusch et al. vorgenommen. 1998 wurde von Hasenbusch et al. $\lambda_{opt} \approx 1.145$ ermittelt [20], Ballesteros et al. fanden im gleichen Jahr $\lambda_{opt} = 1,0(1)$ [21]. Die bisher aktuellsten Ergebnisse lieferte Hasenbusch 1999 in Ref. [13], in welcher auch im Gegensatz zu den beiden anderen Veröffentlichungen das Verhalten der kritischen Kopplung $J_c = 1/T_c$ in Abhängigkeit von λ untersucht wurde. Für den mit $\lambda_{opt} \approx 1.1$ bestimmten Wert, welcher auch mit den beiden anderen obigen Ergebnissen verträglich ist, ergab sich die kritischen Kopplung $J_c = 0.3750966(4)$. Aufgrund dieses sehr genau vorliegenden Wertes wurden in dieser Arbeit die Simulationsparameter $\lambda = 1.1$ sowie $J_c = 0.3750966$ verwendet.
Bei der Simulation wurde zur Änderung der Vorzeichen der Spins ϕ_i der in Kapitel 4.3 beschriebene Wolff-Cluster-Algorithmus benutzt. Die Längen der Spins wurden mit dem Metropolis-Algorithmus geändert, wobei ein neuer Spin ϕ'_i gemäß Gleichung

(4.10) gleichverteilt um ϕ_i vorgeschlagen wurde. Für den Parameter s wurde $s = 2$ gewählt. Dies lieferte in dem simulierten Bereich der J-H-Kombinationen Akzeptanzwahrscheinlichkeiten zwischen 59 % und 67 %. Eine genauere Betrachtung wird im folgenden Kapitel vorgenommen. Versuche, den Parameter s abhängig von der Kopplung und vom Magnetfeld zu wählen oder ϕ_i' gaußverteilt oder mittels Importance sampling vorzuschlagen, brachten keine wesentliche Verbesserung.
Ein elementarer Monte-Carlo-Update besteht aus einer Anzahl n Cluster-Updates, gefolgt von einem Metropolis-Sweep. Es zeigte sich, daß die durchschnittlichen Cluster-Größen stark mit der Temperatur variieren, in der heißen Phase ($T > T_c$) von ca. 0.05 % des Gittervolumens bis zu ca. 30 % des Volumens in der kalten Phase ($T < T_c$). Daher wurde das Verhältnis n in der heißen Phase größer gewählt ($10 \leq n \leq 25$) als in der kalten ($3 \leq n \leq 8$). Die Zahl der elementaren Updates zwischen zwei Messungen von Observablen wurde jeweils so gesetzt, daß sich integrierte Autokorrelationszeiten in der Energie und der Magnetisierung von $\tau_{int} \lesssim 3$ für Gitterlängen $L \leq 48$ und $\tau_{int} \lesssim 5$ für $L \geq 72$ ergaben. Insgesamt wurden in der Regel 20000 Messungen, bei Gitterlängen von $L = 24$ teilweise auch 40000 Messungen durchgeführt. Dabei wurde von einer geordneten Startkonfiguration mit $\phi_i = 1$ für jeden Spin ausgegangen, worauf zwei Thermalisierungsphasen folgten. Zuerst wurden bei festgehaltener Spinlänge $|\phi_i| = 1$ Clusterupdates durchgeführt, danach wurde durch elementare Monte-Carlo-Updates auch eine Thermalisierung in der Verteilung der Spinlängen erreicht.
Neben der Energie E und der Magnetisierung m wurden weiterhin die jeweils über die drei Raumrichtungen gemittelte Fouriertransformierte F der Korrelationsfunktion und der nicht-zusammenhängende Anteil der Korrelationsfunktion $\langle S_0 S_\tau \rangle$ für $0 \leq \tau \leq L/2$ gemessen. Aufgrund des hohen Speicherplatzbedarfs wurde darauf verzichtet, jeden Wert für $\langle S_0 S_\tau \rangle$ zu speichern, es wurde statt dessen über jeweils 500 Daten ein Mittelwert gebildet und ausgegeben. Außerdem wurden nach 500 Iterationen Durchschnittswerte der Spinlängen sowie der Akzeptanzwahrscheinlichkeit des Metropolis-Algorithmus bestimmt. Aus den Observablen konnten weiterhin die Suszeptibilität χ gemäß Gleichung (1.10), die Korrelationslänge ξ^F mittels Gleichung (1.45) und die Korrelationslänge ξ^{2nd} entsprechend Gleichung (1.22) berechnet werden. Dabei wurde zur Bestimmung von ξ^{2nd} zunächst die zusammenhängende Korrelationsfunktion $\bar{G}(\tau)$ ermittelt, das zweite Moment μ_2 nach Gleichung (1.33) berechnet und für μ_0 in Gleichung (1.22) die Suszeptibilität verwendet. Die Fehleranalyse der in der hier vorliegenden Arbeit bestimmen Observablen wurde mit der in Kapitel 4.4 beschriebenen Jackknife-Methode durchgeführt, wobei sich $N = 10$ Datenblöcke als sinnvoll erwiesen.
Als weitere bei der Auswertung benutzte Größen sind die kritischen Exponenten zu nennen. Hierbei stellte sich die Frage, welche Literaturwerte zu benutzen waren. Tabelle 5.1 gibt durch Monte-Carlo-Simulationen erhaltene Exponenten wieder, welche auch zur Bestimmung von $\lambda_{opt} \approx 1.1$ in Ref. [13] benutzt wurden, sowie durch d=3-Entwicklung ermittelte. Letztere werden in dieser Arbeit verwendet, da die numerisch bestimmte Zustandsgleichung $y = f(x)$ mit einer theoretischen Vorhersage

verglichen werden soll, die auf den feldtheoretisch errechneten Exponenten basiert. Im weiteren Verlauf werden die Exponenten als konstant und ohne Fehler angenommen.

Ref.	[13]	[22]
Methode	MC	d=3-Entw.
β	$0.3261(13)^*$	$0.3258(14)$
δ	$4.792(16)^*$	$4.805(17)^*$
ν	$0.6296(7)$	$0.6304(13)$
ν_c	$0.403(2)^*$	$0.403(2)^*$
η	$0.0358(9)$	$0.0335(25)$
ω	$0.845(10)$	$0.799(11)$

Tabelle 5.1: Kritische Exponenten des $3d$-Isingmodells. Die mit * gekennzeichneten Werte sind durch die Skalenrelationen (2.10) berechnet. In dieser Arbeit sind die Exponenten aus Ref. [22] benutzt worden.

5.2 Verteilung der Spinlängen und Metropolis-Akzeptanzwahrscheinlichkeiten

Ein wesentlicher Unterschied zum Standard-Isingmodell besteht bei Verwendung der verbesserten Wirkung in der Tatsache, daß die Spins nicht mehr auf den Betrag eins beschränkt sind. Um einen Eindruck zu erhalten, wie diese Wirkung die Längen der Spins beeinflußt, untersuchten wir zunächst deren Verteilung für verschiedene J-H-Kombinationen.

Abbildung 5.1 zeigt exemplarisch ein Histogramm der $|\phi|$-Verteilung in Abhängigkeit von $J = 1/T$ bei einem Magnetfeld von $H = 0.002$ eines 24er Gitters. Die vier Kopplungen stellen dabei eine Auswahl aus dem in dieser Arbeit verwendeten Bereich von $J = 0.365$ bis $J = 0.4$ dar. Die Spins nehmen demnach Werte im Intervall $-2 \lesssim \phi \lesssim 2$ an, werden auch die durch die Clusterupdates hervorgerufenen Vorzeichenwechsel berücksichtigt. Es läßt sich erkennen, daß sich die Maxima und die durchschnittlichen Spinlängen mit kleinerer Temperatur zu größeren $|\phi|$-Werten verlagern. Dies ist konsistent mit der Beobachtung, daß auch die Magnetisierung des Systems mit sinkender Temperatur zunimmt, wie im folgenden zu sehen sein wird. Einen ähnlichen, aber schwächer ausgeprägten Effekt erhält man durch Variation des äußeren Feldes bei konstantem J, wie Abbildung 5.2 zeigt. Die dargestellten H-Werte repräsentieren dabei den von uns verwendeten Wertebereich. Auch hier

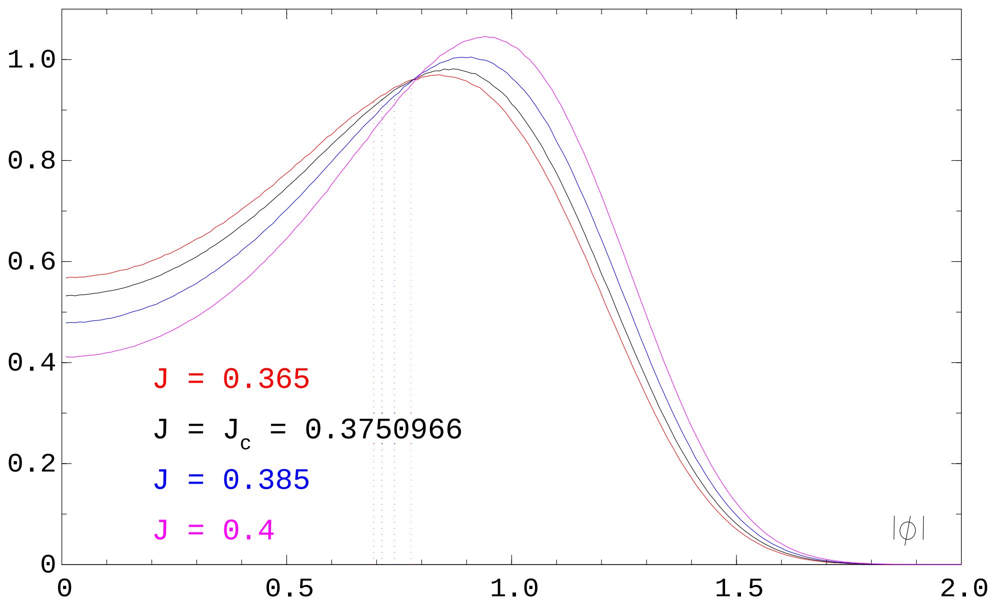

Abbildung 5.1: Spinlängenverteilung bei festem $H = 0.002$ in Abhängigkeit von J (Gittergröße $L = 24$). Die vertikalen Linien markieren die jeweilige durchschnittliche Spinlänge.

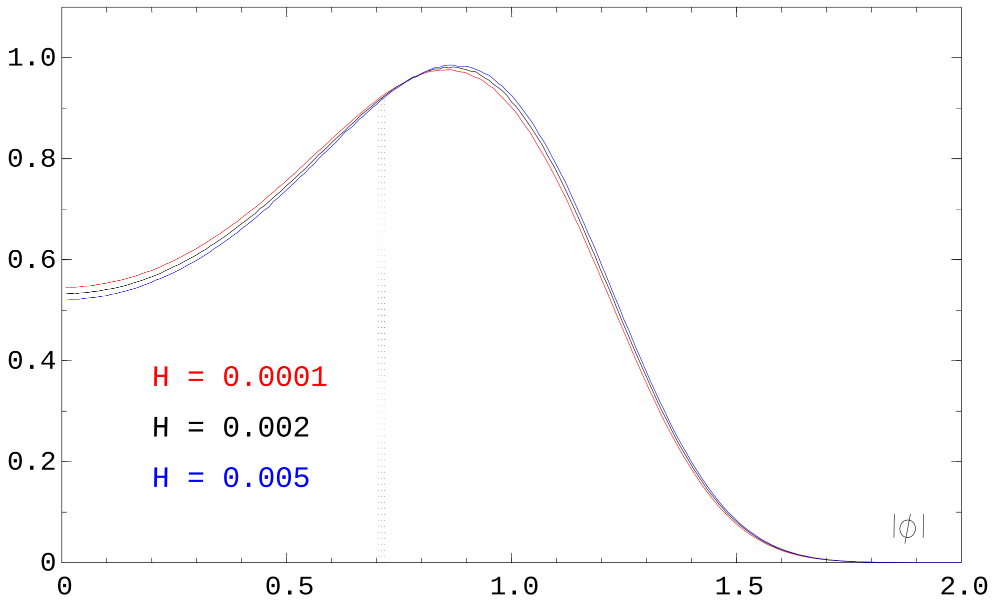

Abbildung 5.2: Spinlängenverteilung bei festem $J = J_c$ in Abhängigkeit von H (Gittergröße $L = 24$).

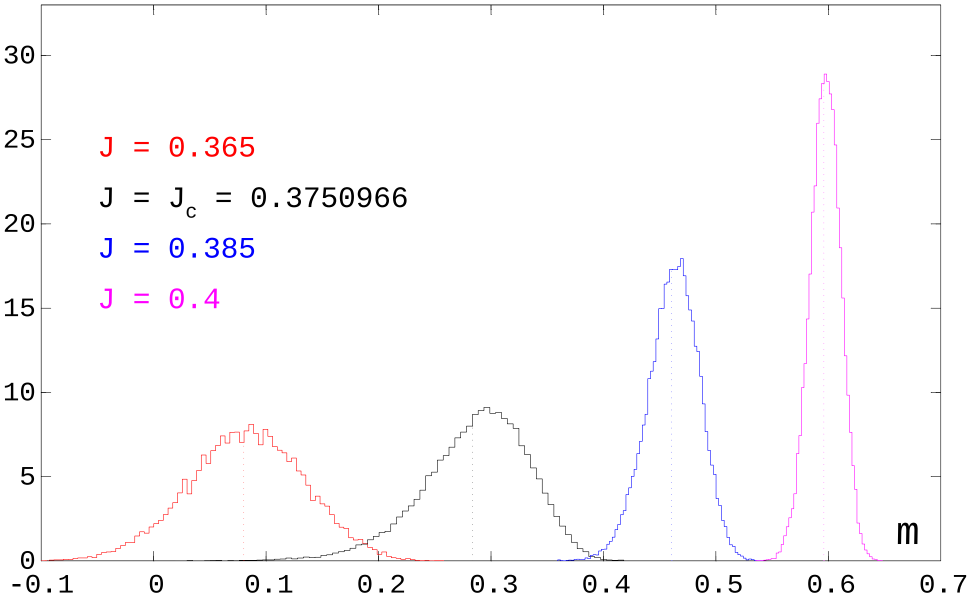

Abbildung 5.3: Magnetisierungsverteilung bei festem $H = 0.002$ in Abhängigkeit von J (Gittergröße $L = 24$). Die vertikalen Linien markieren die jeweilige mittlere Magnetisierung.

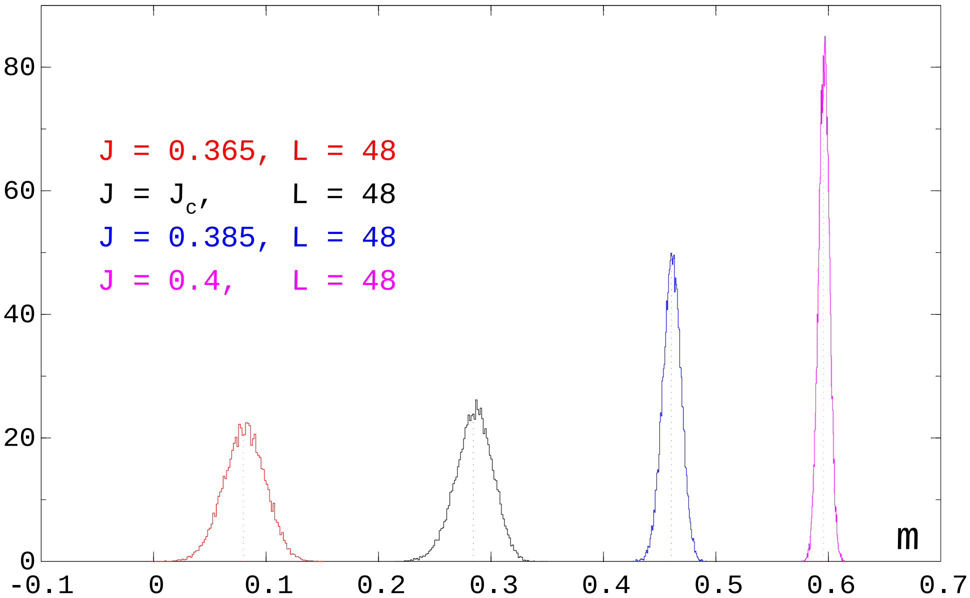

Abbildung 5.4: Magnetisierungsverteilung wie in Abbildung 5.3, jedoch bei größeren Gitterlängen L.

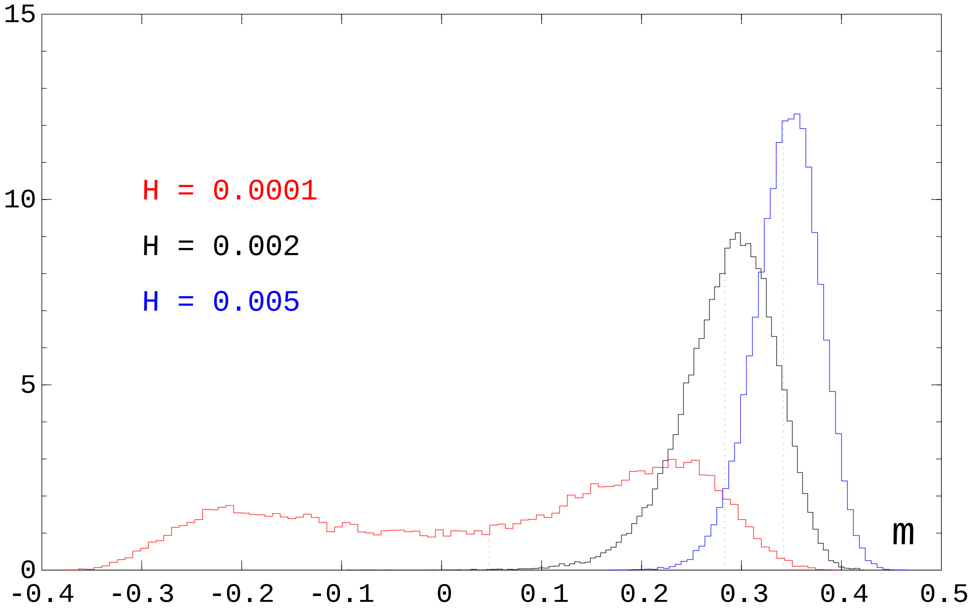

Abbildung 5.5: Magnetisierungsverteilung bei festem $J = J_c$ in Abhängigkeit von H (Gittergröße $L = 24$).

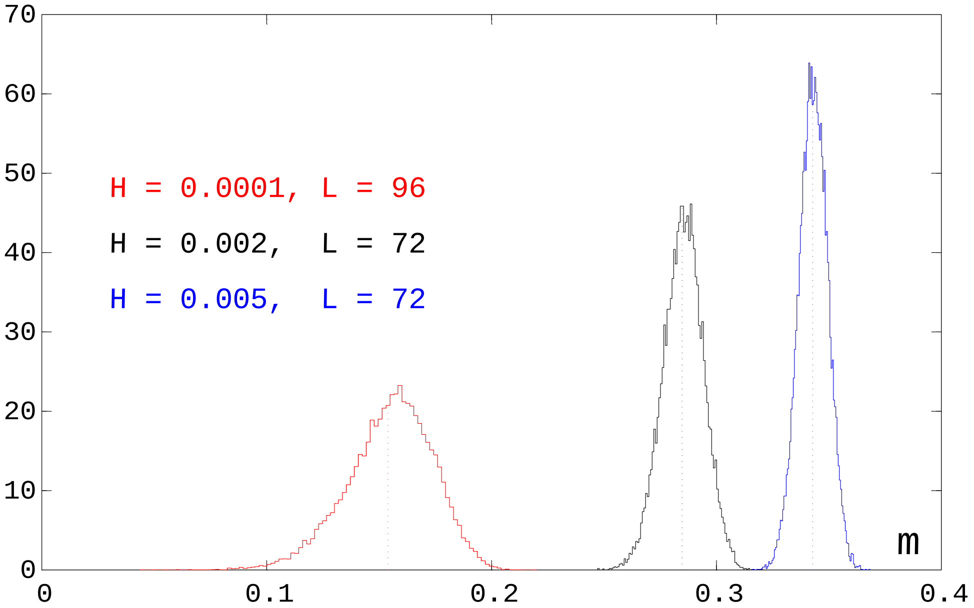

Abbildung 5.6: Magnetisierungsverteilung wie in Abbildung 5.5, jedoch bei größeren Gitterlängen L.

ergibt sich mit zunehmendem Feld eine größere mittlere Spinlänge, entsprechend einer höheren Magnetisierung.
Betrachten wir daher auch zum Vergleich zu dem Verhalten der Spinlängenverteilung die entsprechenden Histogramme der Magnetisierung. Bei festem $H = 0.002$ verschieben sich die m-Verteilungen zu größeren Werten und werden dabei deutlich schmaler, wie in Abbildung 5.3 zu sehen ist. Außerdem ist die Verteilung stark L-abhängig im Gegensatz zur Verteilung der Spinlängen, welche überhaupt keine Abhängigkeit von der Gittergröße aufweist. Das zu Abbildung 5.3 korrespondierende Histogramm, jedoch für die größere Gitterlänge $L = 48$, ist in Abbildung 5.4 dargestellt. Die Histogramme werden mit wachsendem L spitzer, die Mittelwerte bleiben ungefähr gleich, so daß diese (fast) keinen Finite-Size-Effekt mehr aufweisen. Untersucht man das Verhalten für wachsende H-Felder bei konstantem J, so ergibt sich auch hier ein Zuspitzen der Verteilungen. In Abbildung 5.5 ist dies wiederum am Beispiel $J = J_c$ dargestellt. Während sich die Magnetisierungen der einzelnen Konfigurationen bei $H = 0.0001$ bis weit in den negativen Bereich erstrecken, nehmen sie für größere H-Felder nur positive Werte an. Einen stark ausgeprägten Finite-Size-Effekt erkennt man insbesondere bei kleinem H. Mit wachsendem Volumen geht die Anzahl der negativen Magnetisierungen zurück, und die Verteilung verschiebt sich ganz in den positiven Bereich, was in Abbildung 5.6 zu erkennen ist. Dabei sei noch auf die Beachtung der unterschiedlichen Skalen der Abbildungen 5.5 und 5.6 hingewiesen.

Ein ähnlicher Effekt ist bei der Analyse der Magnetisierungsverteilungen bei kleinen H-Feldern in der kalten Phase zu beobachten. Am kritischen Punkt liegt für kleine Volumina eine von negativen bis zu positiven m-Werten kontinuierliche Verteilung vor, wie das Histogramm für $H = 0.0001$ in Abbildung 5.5 zeigt. Im Gegensatz dazu weist das für die kalte Phase repräsentativ bei $J = 0.38$ und kleinem Feld $H = 0.0002$ untersuchte Histogramm bei $L = 24$ zwei getrennte Maxima auf. Dies ist in Abbildung 5.7 mit der roten Kurve dargestellt. Die Magnetisierung ist hauptsächlich im positiven Bereich (um $m \approx 0.35$) verteilt. Jedoch ergibt sich ein weiterer, kleinerer Peak um $m \approx -0.35$. Die Anzahl dieser negativen Werte sinkt mit zunehmender Gittergröße, während die der positiven anwächst, so daß sich die Verteilung dem thermodynamischen Limes nähert. Damit ist der Erwartungswert der Magnetisierung stark finite-size-behaftet. Für $L = 48$ (blaue Kurve in Abbildung 5.7) nimmt m schließlich nur noch positive Werte an. Der Finite-Size-Effekt kann durch die Wahl eines alternativen Ordnungsparameters anstelle von m reduziert werden. Definiert man

$$m^* \ = \ \frac{1}{V} \left\langle \left| \sum_i \phi_i \right| \right\rangle , \tag{5.1}$$

so werden die bei einigen Konfigurationen auftretenden negativen Magnetisierungen als positive gewichtet. Abbildung 5.7 gibt dies durch das violette Histogramm wieder. Der mittels m^* berechnete Erwartungswert liegt mit 0.3595(3) deutlich näher

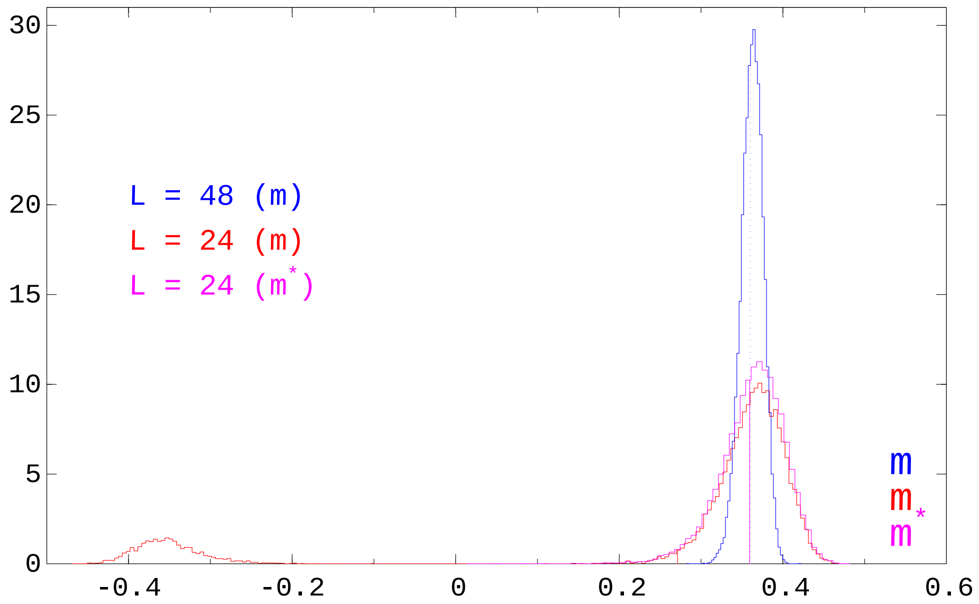

Abbildung 5.7: Verteilung des Ordnungsparameters m sowie m^*, entsprechend Gleichung (5.1) definiert, in Abhängigkeit von L bei $J = 0.38$ und $H = 0.0002$. Die vertikalen Linien spiegeln den jeweiligen Erwartungswert wider.

bei dem des 48er Gitters von 0.3601(2), während sich ein Wert von 0.2712(17) beim 24er Gitter unter Verwendung von m ergibt. Dieser sich durch die im negativen Bereich verteilten Werte ergebende Finite-Size-Effekt wirkt sich, wie wir in Kapitel 5.7 noch näher untersuchen werden, auch auf die Bestimmung der Korrelationslänge aus.

Im Zusammenhang mit der verbesserten Wirkung des Isingmodells betrachteten wir weiterhin die durchschnittlichen Akzeptanzwahrscheinlichkeiten des Metropolis-Algorithmus. Auch hier zeigt sich eine größere Abhängigkeit von der Kopplung als vom äußeren Feld, wie in Abbildung 5.8 zu sehen ist. Die Akzeptanzrate sinkt von ca. 67 % bei $J = 0.365$ bis auf ca. 59 % bei $J = 0.4$. Da die neuen Spins ϕ_i' gleichverteilt um ϕ_i mit der Vorschrift

$$\phi_i' = \phi_i + 2\left(r - \frac{1}{2}\right) \tag{5.2}$$

mit einer im Intervall [0,1) gleichverteilten Zufallszahl r vorgeschlagen werden, läßt sich diese Beobachtung mit Hinblick auf die oben untersuchte Verteilung der Spinlängen erklären. Bei wachsender Kopplung wird die Verteilung in Abbildung 5.1 spitzer, so daß mehr Vorschläge abgelehnt werden. Da die H-Abhängigkeit dieses Effektes weitaus geringer ist, variiert auch die Akzeptanz nur schwach bei Änderung des Feldes.

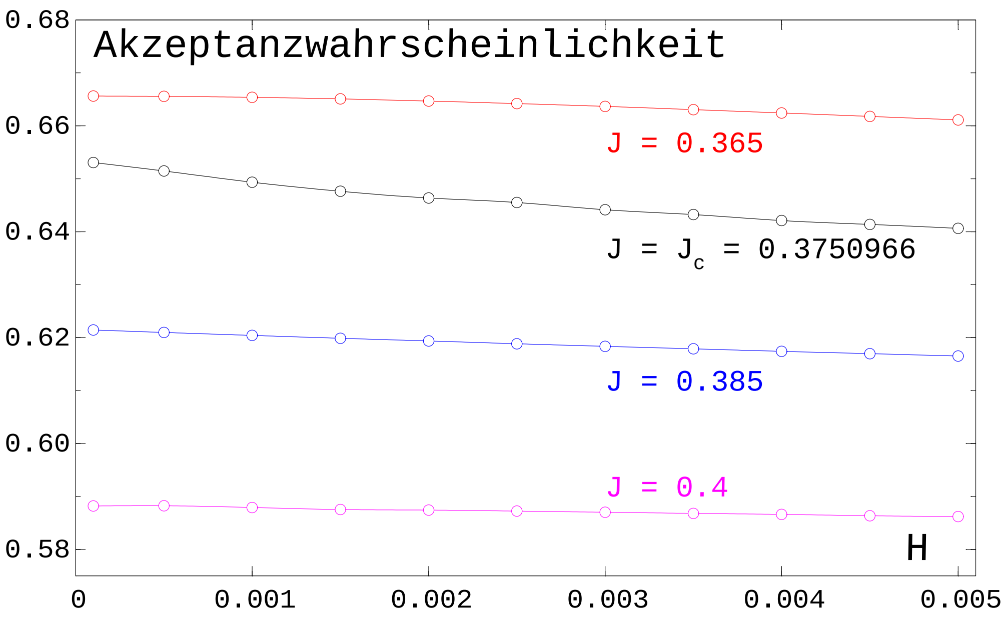

Abbildung 5.8: Akzeptanzwahrscheinlichkeiten des Metropolis-Algorithmus in Abhängigkeit von J und H (Gittergröße $L = 24$). Die Daten sind mit einem Spline verbunden.

5.3 T_0-Bestimmung

Um die mit dem Faktor T_0 normierte Temperaturskala zu erhalten, betrachteten wir Simulationen bei $T < T_c$ und $H = 0$. Auf der Koexistenzlinie gilt für die Magnetisierung des Systems in der Nähe des kritischen Punktes das Potenzgesetz (2.23), d. h.,

$$m = \left(\frac{T_c - T}{T_0}\right)^{\beta} = b\,(T_c - T)^{\beta} \tag{5.3}$$

mit dem Faktor

$$b = T_0^{-\beta}. \tag{5.4}$$

Bei Berücksichtigung von Corrections to Scaling in Form von Hinzunahme des ersten analytischen sowie nicht-analytischen Termes, wie im Kapitel 2.4 beschrieben, ergibt sich

$$m = b\,(T_c - T)^{\beta}\left[1 + b_1\,(T_c - T)^{\omega\nu} + b_2\,(T_c - T)\right]. \tag{5.5}$$

Aus diesen Gleichungen läßt sich somit die Normierungsgröße T_0 mittels des Faktors b bestimmen.
Allerdings unterscheidet sich die spontane Magnetisierung in einem unendlich großen System von der von uns im endlichen Volumen gemessenen. Im Limes $V \to \infty$ stellt sich eine Magnetisierung $m \neq 0$ ein, bei endlichem V ist für $H = 0$ jedoch $m = \langle\phi\rangle = 0$. Daher bedient man sich des von null verschiedenen Ordnungsparameter m^* gemäß Gleichung (5.1), welcher bei $H = 0$ eine gute Näherung zur Magnetisierung m im unendlichen Volumen darstellt. Wir überzeugten uns davon, indem Simulationen bei kleinen Werten $H > 0$ durchgeführt wurden, bei welchen die Magnetisierungen innerhalb der Fehler gegen die bei $H = 0$ gemessenen Werte m^* konvergierten. Bei den Simulationen wurde die Ausdehnung L der Gitter jeweils so gewählt, daß sich bei festem J die Werte für m^* der beiden größten Volumina innerhalb der Fehlergrenzen überschnitten. Somit lassen sich die Daten für das jeweilige maximale L als finite-size-frei annehmen. Es zeigt sich, daß bei Annäherung an die kritische Temperatur immer größere Gitterlängen nötig sind, um dies zu gewährleisten. Abbildung 5.9 stellt die erhaltenen Daten in dem verwendeten Kopplungsbereich von $0.376 \leq J \leq 0.4$ dar. Diese wurden sowohl mit der Funktion (5.3) als auch mit (5.5) gefittet, wobei die kritischen Exponenten konstant gehalten wurden. Die untere Grenze des Fitbereichs entspricht der Kopplung $J = 0.376$, die obere Grenze wurde dabei variiert, so daß minimal drei bis zu maximal alle vorhandenen 13 Werte in den Fit einbezogen wurden. Verwendet man die Gleichung (5.3), so liefert nur ein relativ kleines Intervall gute Resultate, d. h. einen kleinen Wert für χ^2/dof. In Tabelle 5.2 sind alle Ergebnisse mit $\chi^2/dof < 2$ aufgelistet. Werden die Corrections to Scaling gemäß Gleichung (5.5) berücksichtigt, so erweist sich der Fit in einem relativ großen Bereich als stabil. Tabelle 5.3 zeigt wiederum alle Resultate mit $\chi^2/dof < 2$. Es läßt sich erkennen, daß sich für den Faktor b ein Wert von ca. 1.072 ergibt, welcher auch mit den Resultaten aus Tabelle 5.2 verträglich

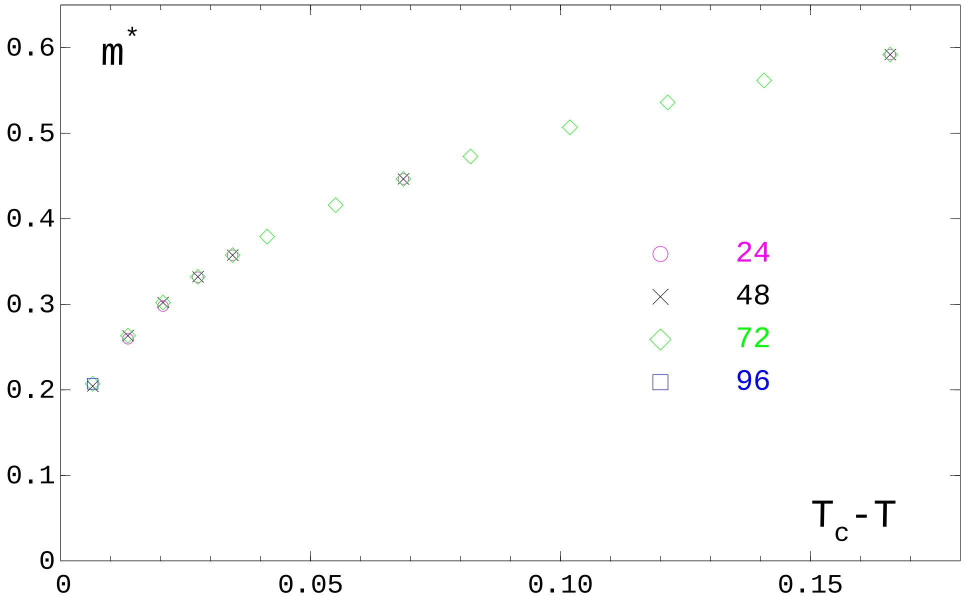

Abbildung 5.9: Die Magnetisierung m^* in Abhängigkeit der Temperatur in der kalten Phase bei $H = 0$. Die unterschiedlichen Symbole repräsentieren die Gitterlängen $L = 24, 48, 72$ und 96.

Anzahl	$(T_c - T)$-Intervall	χ^2/dof	b
3	0.006 - 0.020	1.51	1.0721(2)
4	0.006 - 0.027	1.98	1.0719(1)
5	0.006 - 0.034	1.95	1.0718(1)

Tabelle 5.2: Fit-Ergebnisse ohne Berücksichtigung von Corrections to Scaling. Die erste Spalte gibt die Anzahl der in den Fit eingehenden Meßpunkte an.

Anzahl	$(T_c - T)$-Intervall	χ^2/dof	b	b_1	b_2
6	0.006 - 0.041	1.97	1.071(2)	0.02(2)	-0.12(8)
7	0.006 - 0.055	1.50	1.072(1)	0.02(1)	-0.10(3)
8	0.006 - 0.069	1.32	1.0723(9)	0.01(1)	-0.08(2)
9	0.006 - 0.082	1.13	1.0720(7)	0.012(6)	-0.09(1)
10	0.006 - 0.102	1.25	1.0727(5)	0.006(4)	-0.071(8)
11	0.006 - 0.121	1.22	1.0724(5)	0.008(3)	-0.077(6)
12	0.006 - 0.141	1.08	1.0724(4)	0.009(3)	-0.077(4)
13	0.006 - 0.166	1.51	1.0728(3)	0.006(2)	-0.072(3)

Tabelle 5.3: Fit-Ergebnisse mit Berücksichtigung von Corrections to Scaling.

ist. Die Korrekturen (Faktor b_1), die auf der ersten irrelevanten Skalenvariablen beruhen, sind über den gesamten Bereich sehr gering und in der Nähe von T_c, d. h. für eine kleine Anzahl an eingehenden Meßpunkten, auch mit null verträglich. Hier zeigt sich, daß bei Verwendung der verbesserten Wirkung die erste nicht-analytische Korrektur zu Gleichung (5.3) nur einige Promille bis Prozent des führenden Termes beträgt. Die erste analytische Korrektur (Faktor b_2) übt im Vergleich dazu sogar einen geringfügig größeren Einfluß aus.
Aufgrund der erhaltenen Ergebnisse läßt sich schließlich ein mittlerer Wert $b = 1.072(1)$ angeben, wobei der Fehler auch die Variation der verschiedenen Fits berücksichtigt und wahrscheinlich überschätzt ist. Abbildung 5.10 zeigt die für den Fit benutzten Daten, aufgetragen gegenüber $(T_c - T)^\beta$. Eingezeichnet ist der führende Term der Funktion (5.5) sowie die Funktion mit $b = 1.0724$, $b_1 = 0.009$ und $b_2 = -0.077$ aus Tabelle 5.3, welche dem Fit mit dem geringsten χ^2/dof entspricht, konsistent mit $b = 1.072(1)$ ist und die Daten über einen großen Bereich gut beschreibt.
Um die ermittelte Amplitude b zu bestätigen und unsere bisherige Vorgehensweise zu untermauern, betrachten wir noch eine weitere Methode zur Bestimmung von b.

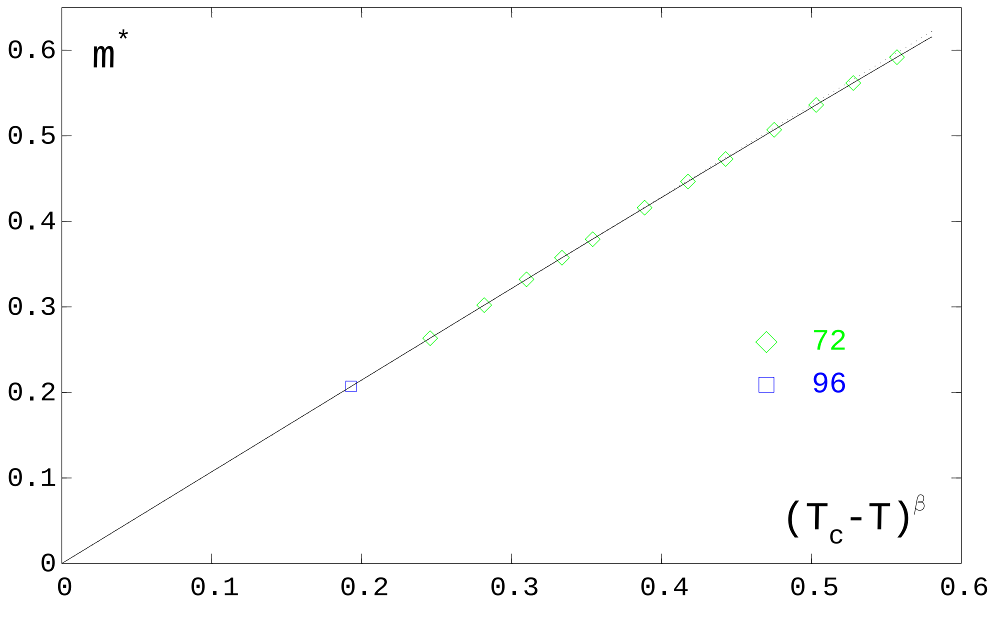

Abbildung 5.10: Fit zur T_0-Bestimmung. Die durchgezogene Kurve zeigt die Funktion $m^* = 1.0724(T_c{-}T)^\beta[1{+}0.009(T_c{-}T)^{\omega\nu}{-}0.077(T_c{-}T)]$, welche dem Fit-Ergebnis aus Tabelle 5.3 mit 12 verwendeten Werten entspricht, die gestrichelte Linie gibt nur den führenden Term wieder.

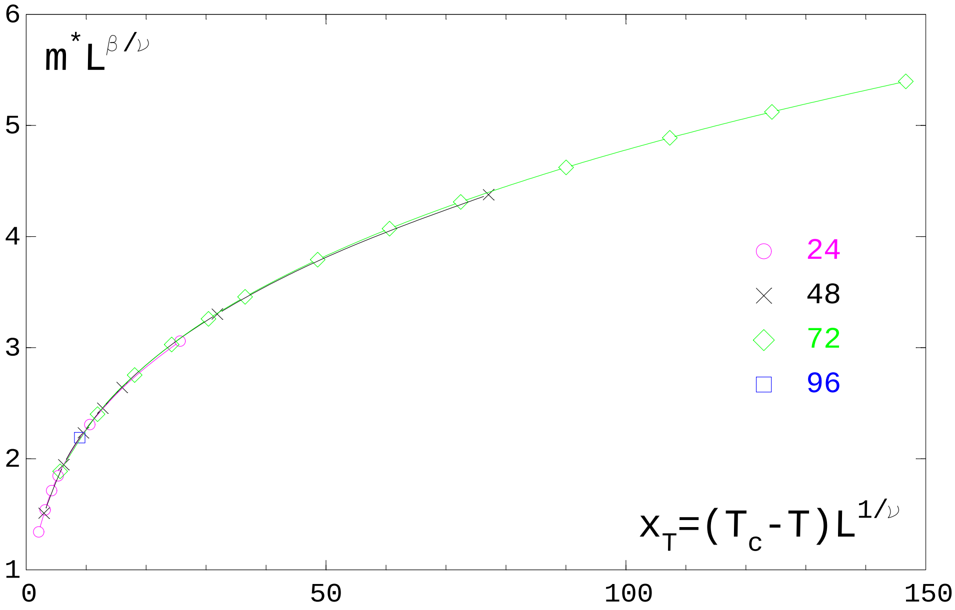

Abbildung 5.11: Finite-Size-Skalenfunktion $Q_m(x_T)$ bei $H = 0$. Die Daten sind durch einen Spline verbunden.

Ausgangspunkt ist die Finite-Size-Skalenfunktion Q_m bei $H = 0$

$$mL^{\frac{\beta}{\nu}} \;=\; Q_m\Big((T_c - T)L^{\frac{1}{\nu}}\Big) \;=\; Q_m(x_T) \tag{5.6}$$

mit der Definition $x_T = (T_c - T)L^{1/\nu}$, wobei Corrections-to-Scaling-Terme vernachlässigt sind. Einen Eindruck, ob die Meßwerte gut skalieren, erhält man durch Abbildung 5.11, welche den Zusammenhang (5.6) darstellt. Ein sichtbares Abweichen vom Skalenverhalten ist nur für die bei der jeweils größten Kopplung ($J = 0.4$) gemessenen Werte des 24er und 48er Gitters zu erkennen. Bis $x_T \approx 35$ liegen die Daten für $L = 48$ und 72 aufeinander, so daß dies den vorhergehenden Fit mit der Funktion (5.3) stützt.
Die Magnetisierung $m = L^{-\beta/\nu}Q_m(x_T)$ muß im Limes unendlichen Volumens unabhängig von L und zudem aufgrund des Verhaltens (5.3) proportional zu $(T_c - T)^\beta$ sein. Man erhält daher bei festem $T_c - T \gtrsim 0$ die Beziehung

$$m \;=\; (T_c - T)^\beta \lim_{x_T \to \infty} x_T^{-\beta}\, Q_m(x_T)\,. \tag{5.7}$$

Somit muß die Amplitudenfunktion

$$A_m^T(x_T) \;=\; x_T^{-\beta}\, Q_m(x_T)\,, \tag{5.8}$$

im Limes $x_T \to \infty$ gegen die Amplitude b konvergieren, d. h.,

$$b \;=\; \lim_{x_T \to \infty} A_m^T(x_T). \tag{5.9}$$

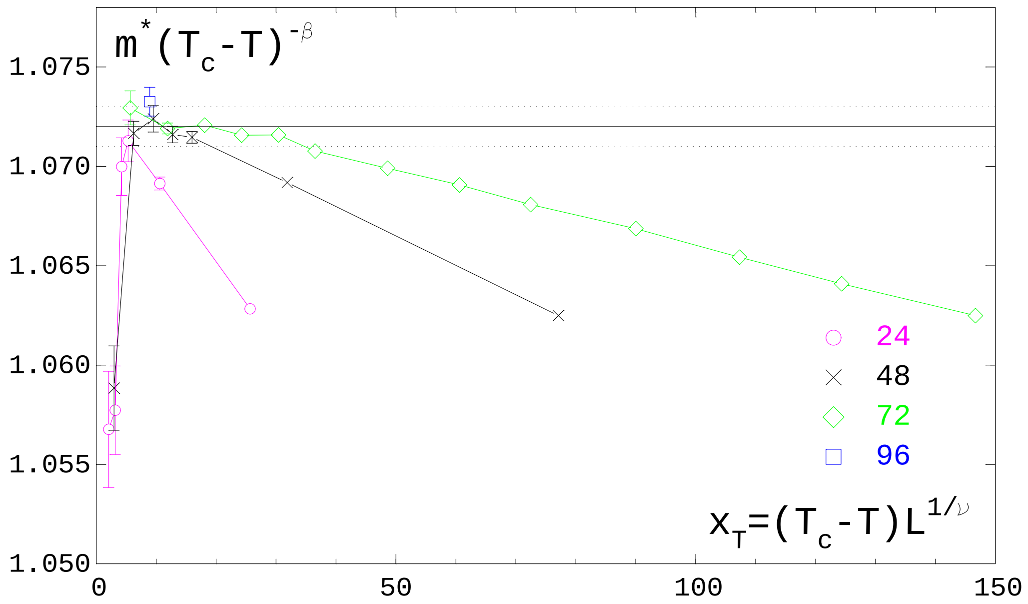

Abbildung 5.12: Amplitudenfunktion $A_m^T(x_T)$. Die Datenpunkte sind linear verbunden. Die horizontalen Geraden geben das zuvor gewonnene Fit-Ergebnis $b = 1.072$ mit einem Fehler von 0.001 wieder.

Trägt man $A_m^T = x_T^{-\beta} m L^{\beta/\nu} = m(T_c - T)^{-\beta}$ gegenüber x_T auf, so ergibt sich daher im Idealfall ohne Corrections to Scaling ein Plateau bei b. In Abbildung 5.12 zeigen sich allerdings noch Korrekturen, welche in dem Finite-Size-Skalenplot 5.11 nicht sichtbar waren. Zumindest läßt sich ein Plateau für $x_T \lesssim 35$ erkennen, was zu unserer vorherigen Abschätzung paßt, und welches innerhalb der Fehler gut mit $b = 1.072(1)$ übereinstimmt.
Gemäß Gleichung (5.4) errechnet sich schließlich die Normierung T_0 mittels

$$T_0 \;=\; b^{-\frac{1}{\beta}}, \tag{5.10}$$

so daß sich mit $b = 1.072(1)$ das Resultat

$$T_0 \;=\; 0.8078(23) \tag{5.11}$$

ergibt, womit die erste Normierung festgelegt ist.

5.4 H_0-Bestimmung

Die Vorgehensweise zur Bestimmung der zweiten Normierungskonstanten H_0 ist ähnlich zu der im vorigen Kapitel. Nun betrachten wir allerdings die Magnetisierung auf der kritischen Isotherme, d. h. bei $t = 0$ und $H > 0$. Hierfür gilt gemäß Gleichung (2.26)

$$m \;=\; \left(\frac{H}{H_0}\right)^{\frac{1}{\delta}} \;=\; d_c\, H^{\frac{1}{\delta}} \tag{5.12}$$

mit

$$d_c \;=\; H_0^{-\frac{1}{\delta}}. \tag{5.13}$$

Auch hier lassen sich noch Corrections-to-Scaling-Terme berücksichtigen, so daß man

$$m \;=\; d_c\, H^{\frac{1}{\delta}} \left[1 + d_c^1 H^{\omega\nu_c} + d_c^2 H\right] \tag{5.14}$$

erhält.

Die gemessenen Magnetisierungen sind in Abbildung 5.13 dargestellt. Dabei wurde bei Gittergrößen von $L = 24$ bis 120 und Feldern von $H = 5 \cdot 10^{-5}$ bis $1.6 \cdot 10^{-2}$ simuliert. Für die anschließenden Fits werden wiederum nur die jeweils größten Gitter berücksichtigt, da diese im Gegensatz zu kleineren Gittern keine sichtbaren Finite-Size-Effekte mehr aufweisen. Zunächst wurde versucht, die Daten mit Gleichung

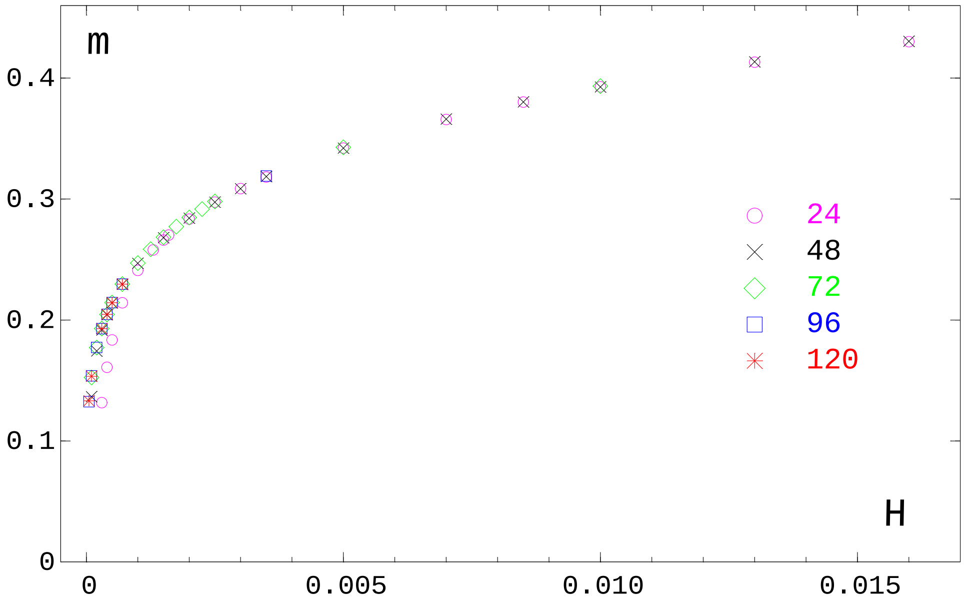

Abbildung 5.13: Die Magnetisierung m in Abhängigkeit des äußeren Feldes H auf der kritischen Isotherme für verschiedene Gittergrößen.

Anzahl	H-Intervall	χ^2/dof	d_c
3	0.00005 - 0.0002	0.65	1.0438(6)
4	0.00005 - 0.0003	0.61	1.0434(3)
5	0.00005 - 0.0004	0.56	1.0433(2)
6	0.00005 - 0.0005	1.47	1.0433(2)

Tabelle 5.4: Fit-Ergebnisse mit Gleichung (5.12).

(5.12) zu fitten. Akzeptable Ergebnisse lassen sich nur im Bereich $H \leq 5 \cdot 10^{-4}$ erzielen, da hier die Näherung (5.12) offensichtlich die Magnetisierung gut beschreibt. Versucht man, weitere Daten in den Fit einzubeziehen, so steigt der Wert für χ^2/dof stark an. Tabelle 5.4 zeigt die Resultate mit $\chi^2/dof < 2$, woraus sich $d_c \approx 1.0435$ abschätzen läßt. Werden nun Corrections to Scaling gemäß Gleichung (5.14) hinzugenommen, so erweist sich der Fit über den gesamten Wertebereich trotz eines recht guten $\chi^2/dof < 1$ als unstabil. Die führende Amplitude d_c nimmt generell größere Werte an, diese schwanken aber im Bereich von 1.044 bis 1.051, woraus sich keine eindeutige Schlußfolgerung ergibt. Der erste Korrekturterm d_c^1 ist für $H \leq 1.25 \cdot 10^{-3}$ mit null verträglich sowie auch die zweite Korrektur d_c^2 für $H \leq 7 \cdot 10^{-4}$, was den vorigen Ansatz (5.12) rechtfertigt. Bei höheren Magnetfeldern bleibt d_c^1 klein (im Bereich einiger Prozent), jedoch variiert d_c^2 von ≈ -0.4 bis ≈ -5.
Daß diese Methode hier möglicherweise einen zu großen Faktor d_c liefert, läßt sich an einer zweiten Darstellungsweise gut erkennen. Dazu betrachten wir analog zum vorigen Kapitel die Finite-Size-Skalenfunktion Q_m sowie die Amplitudenfunktion A_m^H entsprechend bei $t = 0$. Bei Vernachlässigung von Corrections to Scaling gilt

$$mL^{\frac{\beta}{\nu}} \;=\; Q_m\Big(HL^{\frac{1}{\nu_c}}\Big) \;=\; Q_m(x_H) \tag{5.15}$$

mit $x_H = HL^{1/\nu_c}$. Diese Funktion ist in Abbildung 5.14 dargestellt. Man erkennt, daß die Daten für die verschiedenen Gittergrößen nur in einem kleinen vorderen Bereich skalieren. Dies ließ bereits der Fit mit der Funktion (5.12) vermuten, der nur für kleine Intervalle gute Resultate lieferte. Ausgehend von der Finite-Size-Skalenfunktion kann wiederum die Amplitudenfunktion

$$A_m^H \;=\; x_H^{-\frac{1}{\delta}}\, Q_m(x_H) \tag{5.16}$$

definiert werden, welche im Limes $L \to \infty$ bei festem kleinem Feld H gegen die Amplitude d_c konvergiert

$$d_c \;=\; \lim_{x_H \to \infty} A_m^H(x_H). \tag{5.17}$$

Abbildung 5.15 zeigt $A_m^H = x_H^{-1/\delta} mL^{\beta/\nu} = mH^{-1/\delta}$ aufgetragen gegenüber der Skalenvariablen x_H. Zwecks besserer Auflösung sind nur Daten mit $x_H \leq 110$ eingezeichnet, welches dem Bereich entspricht, in dem Meßwerte für das größte Gitter

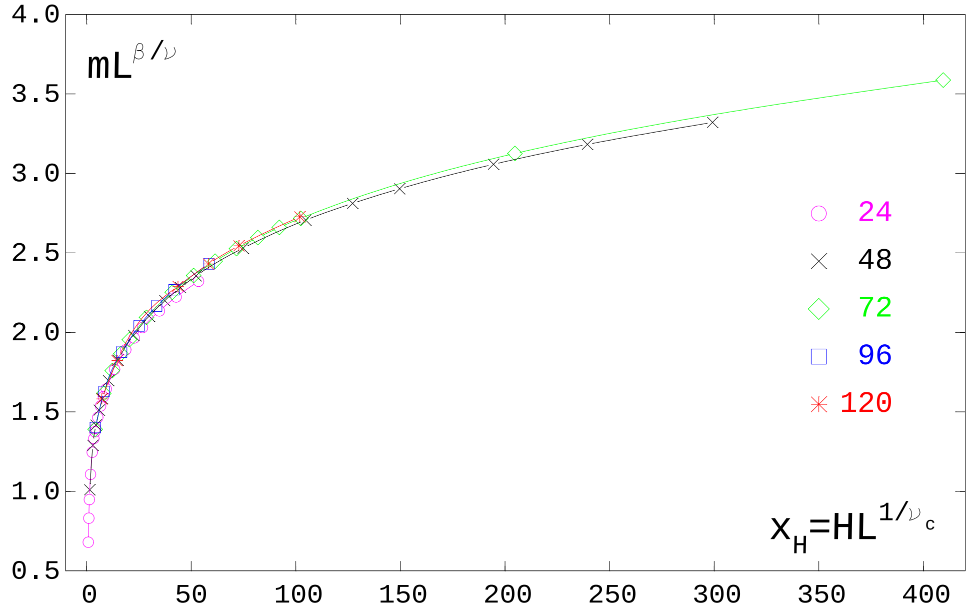

Abbildung 5.14: Finite-Size-Skalenfunktion $Q_m(x_H)$ bei $t = 0$. Die Daten sind durch einen Spline verbunden.

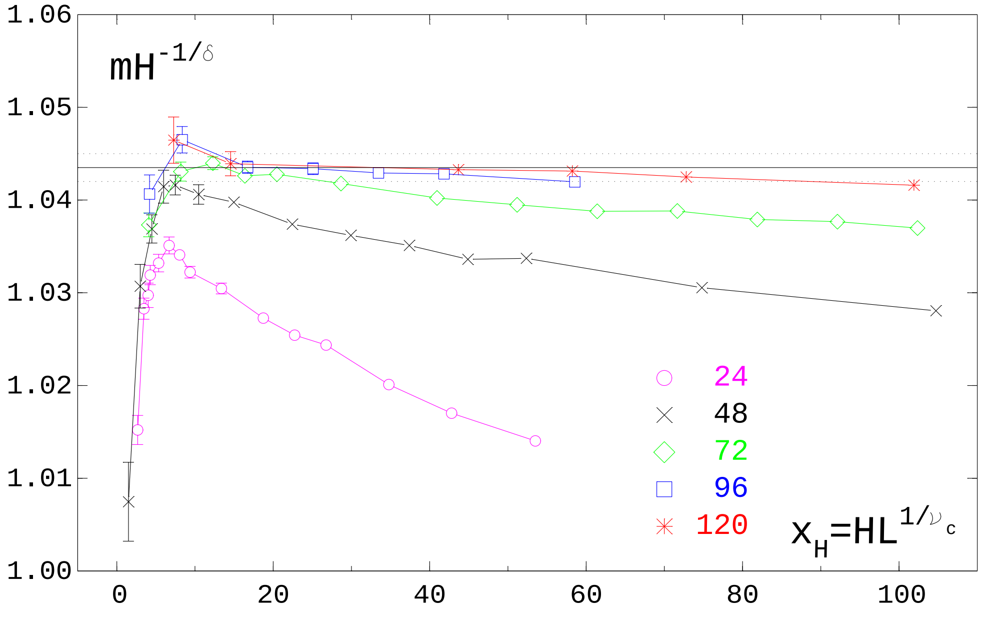

Abbildung 5.15: Amplitudenfunktion $A_m^H(x_H)$. Die Datenpunkte sind linear verbunden. Die horizontalen Geraden geben das Fit-Ergebnis $d_c = 1.0435$ mit einem geschätzten Fehler von 0.0015 wieder.

($L = 120$) vorliegen. Wie schon anhand der negativen Korrekturen d_c^2 sowie der Abbildung 5.14 zu erkennen ist, weichen die Meßwerte nach unten von dem erwarteten Plateau ab, welches sich in Abwesenheit von Corrections to Scaling ergeben sollte. Jedoch zeigt sich die Ausbildung eines Plateaus innerhalb der Fehler der Werte für $L = 120$, 96 und 72, welches auch gut mit dem zuvor ermitteltem Wert $d_c = 1.0435$ mit einem geschätzten Fehler von 0.0015 übereinstimmt. Aus diesem Resultat und den Ergebnissen der Fits in Tabelle 5.4 läßt sich daher der Wert

$$d_c \;=\; 1.0435(15)$$

abschätzen. Ein Wert $d_c > 1.045$, wie es ein Fit mit Berücksichtigung von Corrections to Scaling nahelegt, ist bei Betrachen der Abbildung 5.15 nicht sehr wahrscheinlich. Abschließend errechnet sich hieraus gemäß

$$H_0 \;=\; d_c^{-\delta} \tag{5.18}$$

die Normierung der Magnetfeldskala zu

$$H_0 \;=\; 0.8150(56). \tag{5.19}$$

5.5 Zustandsgleichung der Magnetisierung

Nachdem die beiden Normierungen T_0 und H_0 für unser verwendetes Modell bestimmt wurden, kann nun die für die Ising-Klasse universelle Zustandsgleichung der Magnetisierung bestimmt werden. Dafür wurden Simulationen bei der kritischen Kopplung sowie bei jeweils sechs Kopplungen in der heißen und kalten Phase durchgeführt. Der Bereich erstreckte sich von $J = 0.385$ ($\hat{=}\ t \approx -0.085$) bis $J = 0.365$ ($\hat{=}\ t \approx 0.074$). Dabei wurde das äußere Feld von $H = 0.0001$ bis $H = 0.005$ variiert. Für die Skalenfunktion werden letztendlich nur solche Ergebnisse verwendet, die dem thermodynamischen Limes entsprechen, d. h., bei denen die Magnetisierungen innerhalb kleiner Fehler keine Volumenabhängigkeit mehr aufweisen. Dies ist für kleine Kopplungen in der heißen Phase schon bei Gittergrößen von $L = 48$ erreicht, während bei Annäherung an die kritische Temperatur Längen von $L = 72$ und 96 nötig sind. Dabei nimmt der Finite-Size-Effekt bei abnehmendem H-Feld zu, so daß für kleinere Felder größere Volumina erforderlich sind. Am kritischen Punkt selbst erwiesen sich erst Simulationen mit $L = 120$ als ausreichend. Im Vergleich zur heißen Phase waren in der kalten ebenfalls größere Gitter notwendig.

Wie bereits in Kapitel 3.1 beschrieben, läßt sich die Zustandsgleichung der Magnetisierung einerseits in der Form

$$mh^{-\frac{1}{\delta}} \;=\; f_G\Big(\underbrace{th^{-\frac{1}{\beta\delta}}}_{z}\Big) \tag{5.20}$$

und andererseits in der Widom-Griffiths-Form

$$hm^{-\delta} \;=\; f\Big(\underbrace{tm^{-\frac{1}{\beta}}}_{x}\Big) \tag{5.21}$$

angeben. Dabei gelten diese Zusammenhänge nur unmittelbar in der Nähe des kritischen Punktes. Wie weit sich der Parameterbereich um $t = h = 0$ allerdings erstreckt, in welchem die Daten skalieren, muß zuerst untersucht werden. Um einen Überblick zu erhalten, simulierten wir bei zunächst neun Kopplungen im oben angegebenen Intervall mit jeweils $0.0001 \leq H \leq 0.005$. Die erhaltenen Daten der jeweils größten Gitter sind in der Form (5.20) in Abbildung 5.16 dargestellt. Wie auch in allen folgenden Abbildungen der Zustandsgleichungen werden für die kalte Phase Quadrate und für die heiße Phase Kreise als Symbole verwendet. Es läßt sich erkennen, daß die Datenpunkte für $0.37 \leq J \leq 0.38$ offenbar gut skalieren, während bei $J = 0.365$ und $J = 0.385$ schon leichte Abweichungen vom Skalenverhalten zu sehen sind. Bei $t = 0$ ist die Normierungsbedingung $f_G(0) = 1$ gut erfüllt, wobei hier nur Daten mit $H \leq 0.0005$ vorliegen. Es zeigt sich allerdings, daß im Vergleich zu dieser Darstellungsweise die Widom-Griffiths-Form (5.21) den Skalenbereich weitaus genauer erfaßt. Betrachten wie dazu die Abbildung 5.17. Die gebrochene Phase, welche mit der Skalenvariablen z durch $z < 0$ gegeben war, wird hier durch das Intervall $-1 \leq x < 0$ repräsentiert. Der Limes $z \to -\infty$ $(h = 0)$ wird auf die Stelle $x = -1$ projiziert, so daß auch Magnetisierungen für $h = 0$ dargestellt werden können. Der Bereich oberhalb der kritischen Temperatur wird in der Widom-Griffiths-Darstellung jedoch extrem gestreckt, weshalb hier zunächst nur die Kopplungen bis $J = 0.373$ eingetragen sind. Im Vergleich zu Abbildung 5.16 läßt sich hier ein deutliches Abweichen vom Skalenverhalten für zunehmende h-Felder erkennen. Dabei entspricht wachsendes h bei festem J abnehmendem $|x|$. Bestätigt wird wiederum die Normierung $(x = 0, y = 1)$. Auch der Punkt (-1,0) wird innerhalb der Fehler durch die Daten wiedergeben. Jedoch skalieren die Meßwerte bei $J = 0.385$ auch für kleine Felder nicht mit denen der anderen Kopplungen.

Nach diesen Analysen kann man schließlich feststellen, daß für $t < 0$ nur Werte mit $H \leq 0.0005$ und für $t > 0$ nur Daten mit $H \lesssim 0.002$ in den Skalenplot aufgenommen werden können, wobei sich das Kopplungsintervall von $J = 0.37$ bis $J = 0.38$ erstreckt. Um die entstehenden Lücken zu füllen, welche durch das Weglassen der nicht mehr skalierenden Punkte zustande kommen, führten wir bei vier weiteren Kopplungen nahe J_c sowie bei einigen zusätzlichen kleinen H-Werten Simulationen durch. Aufgrund der Erfahrungen bei den Simulationen benachbarter Kopplungen wurde darauf verzichtet, explizit die L-Abhängigkeit zu untersuchen. Benutzt wurden Gitterlängen von $L = 72$ und 96, bei welchen die Magnetisierung als finite-size-frei

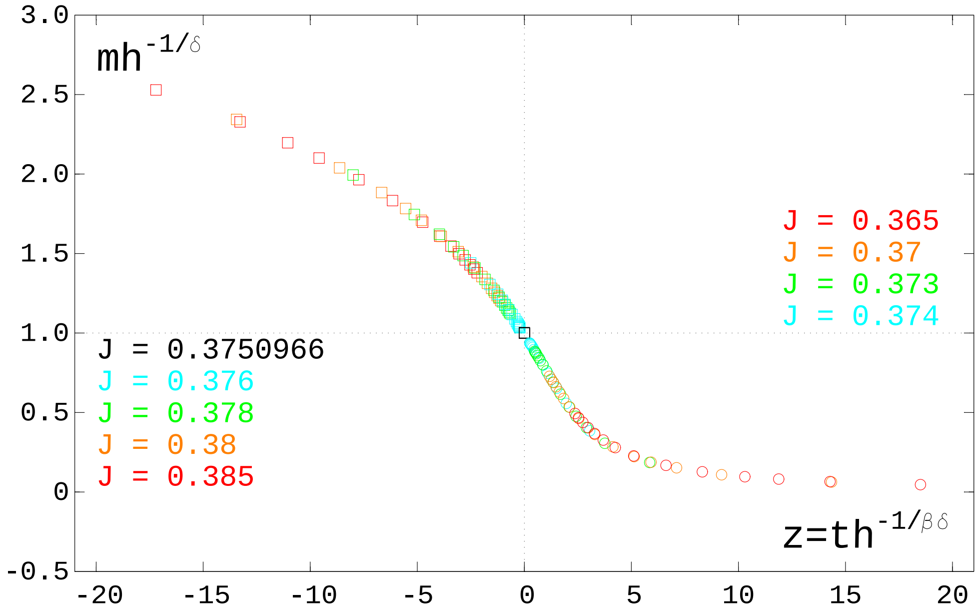

Abbildung 5.16: Zustandsgleichung $f_G(z)$. Die Quadrate symbolisieren Kopplungen $J \geq J_c$, die Kreise $J < J_c$. Verwendet sind alle Daten der jeweils größten Gitter im Bereich $0.0001 \leq H \leq 0.005$.

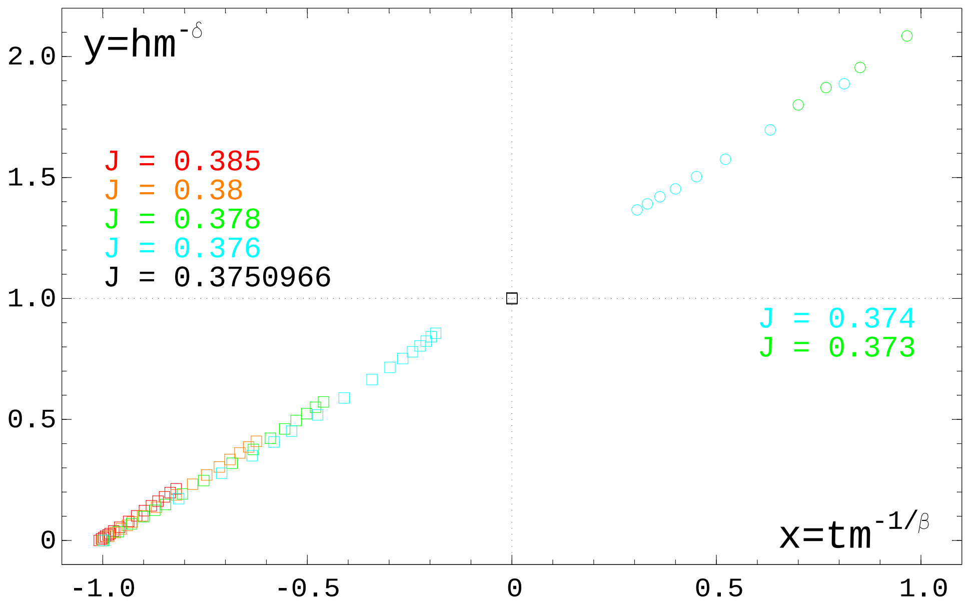

Abbildung 5.17: Die Zustandsgleichung in der Widom-Griffiths-Form mit allen Daten der jeweils größten Gitter im Bereich $0.0001 \leq H \leq 0.005$.

J	H	$\#N$
0.38	0.0001 - 0.0003	3
0.378	0.0001 - 0.0005	5
0.376	0.0001 - 0.0005	5
0.3755	0.0001 - 0.0005	4
0.3752	0.0001 - 0.0005	3
0.3750966	0.0001 - 0.0005	4
0.375	0.00015 - 0.0005	3
0.3745	0.0001 - 0.0015	8
0.374	0.0001 - 0.0015	8
0.373	0.0003 - 0.0025	10
0.37	0.0001 - 0.0015	8

Tabelle 5.5: J- sowie H-Bereich der für die Zustandsgleichung verwendeten Daten. $\#N$ gibt die Anzahl der Meßpunkte pro Kopplung wieder.

angenommen werden konnte. Der Bereich der letztendlich für die Zustandsgleichung verwendeten Daten ist in Tabelle 5.5 dargestellt.
Die somit numerisch bestimmte Zustandsgleichung soll nun mit einer theoretischen Vorhersage verglichen werden. Wir orientieren uns dazu an der Arbeit von J. Zinn-Justin [22], dessen Ergebnisse zu den aktuellsten und genauesten auf diesem Gebiet zählen. Zinn-Justin verwendete die in den Kapiteln 3.2 und 3.3 beschriebenen feldtheoretischen Methoden zur Bestimmung der Zustandsgleichung in der parametrisierten Form (3.39)

$$
\begin{aligned}
m &= m_0\, R^{\beta}\, \theta, \\
t &= R\left(1-\theta^2\right), \\
h &= h_0\, R^{\beta\delta}\, \hat{h}(\theta).
\end{aligned}
$$

Für die Funktion $\hat{h}(\theta)$ ergab sich in der Näherung eines Polynoms fünften Grades

$$\hat{h}(\theta) \;=\; \theta - 0.76201(36)\,\theta^3 + 0.00804(11)\,\theta^5 \tag{5.22}$$

mit der Nullstelle

$$\theta_0 \;=\; 1.154. \tag{5.23}$$

Mit Hilfe der Gleichungen (3.43)

$$
\begin{aligned}
f(x) &= \frac{\hat{h}(\theta)}{\hat{h}(1)\,\theta^{\delta}}, \\
x &= \frac{1-\theta^2}{\theta_0^2-1}\left(\frac{\theta_0}{\theta}\right)^{\frac{1}{\beta}}
\end{aligned}
$$

kann nun diese Vorhersage zusammen mit unseren Daten in der Widom-Griffiths-Darstellung aufgetragen werden. Dabei variiert der Parameter θ im Intervall $(0,\theta_0]$. $\theta = \theta_0$ entspricht der Stelle $x = -1$, und der Grenzwert $\theta \to 0$ korrespondiert mit $x \to \infty$. In Abbildung 5.18 ist zunächst die kalte Phase dargestellt. Man erkennt, daß die Meßwerte mit der theoretisch bestimmten Funktion gut übereinstimmen. Diese Übereinstimmung setzt sich auch in die heiße Phase fort, die zwecks besserer Auflösung in drei verschiedene Abbildungen getrennt ist. Der Bereich kleiner x in der Nähe des kritischen Punktes ist in Abbildung 5.19 zu sehen. Die Datenpunkte weisen zwar leichte statistische Schwankungen auf, liegen aber innerhalb der Fehlergrenzen auf der theoretisch ermittelten Kurve. Die Zustandsgleichung im Bereich mittlerer x zeigt Abbildung 5.20. Berücksichtigt man schließlich noch die Resultate der kleinsten verwendeten Kopplung $J = 0.37$, so läßt sich die Skalenfunktion nur sinnvoll in einer doppeltlogarithmischen Darstellungsweise auftragen, wie in Abbildung 5.21 zu sehen ist.

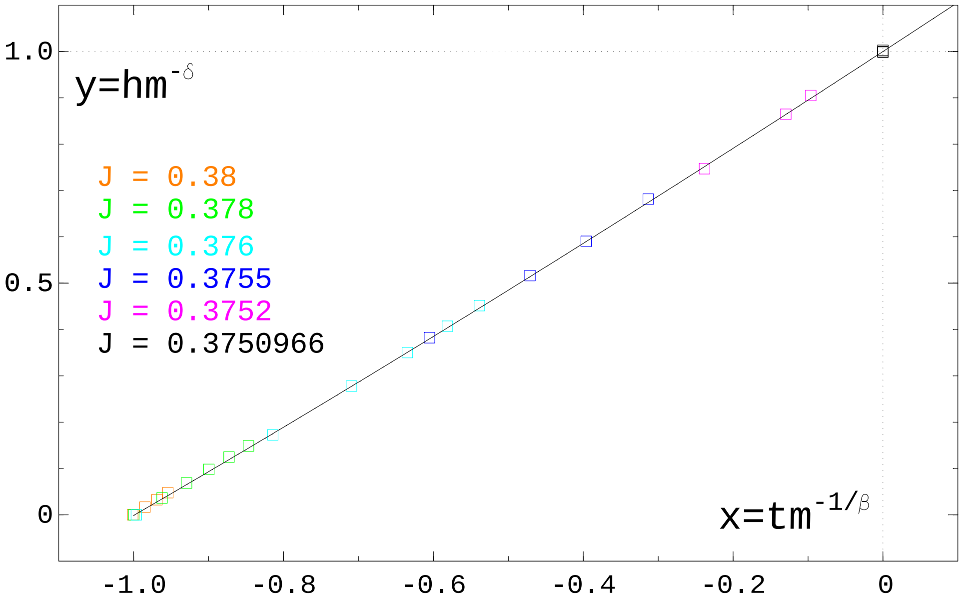

Abbildung 5.18: Widom-Griffiths-Zustandsgleichung in der kalten Phase. Die durchgezogene Linie gibt (wie auch in den Abbildungen 5.19 bis 5.22) die theoretische Vorhersage gemäß Gleichung (5.22) wieder.

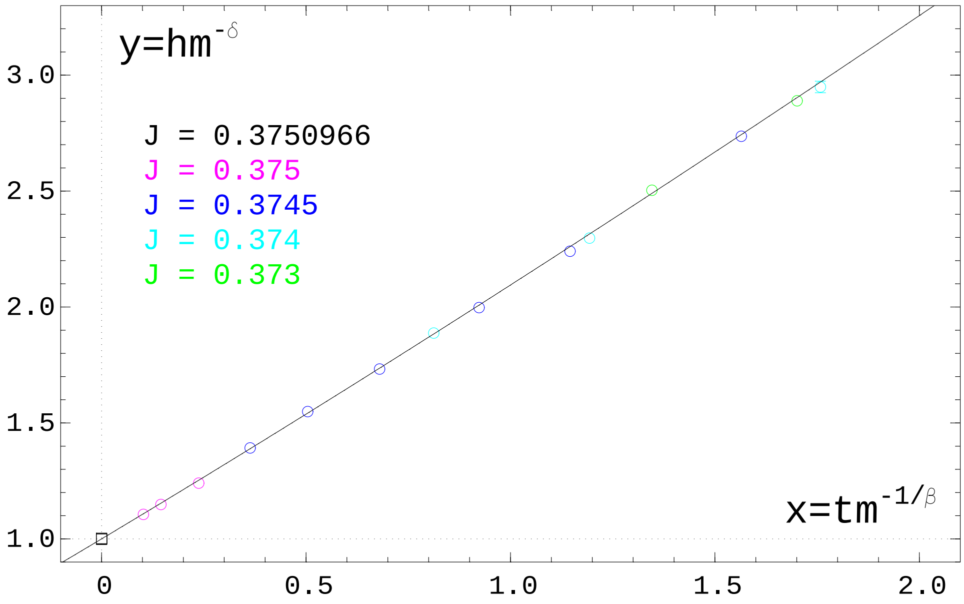

Abbildung 5.19: Widom-Griffiths-Zustandsgleichung in der heißen Phase nahe der kritischen Temperatur, d. h. für kleine x.

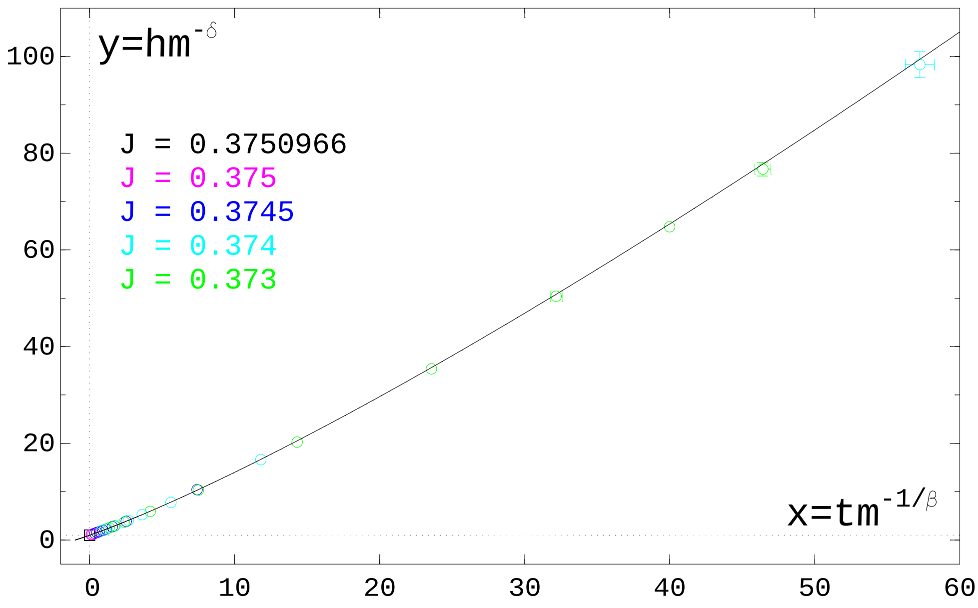

Abbildung 5.20: Widom-Griffiths-Zustandsgleichung in der heißen Phase für den Bereich mittlerer x.

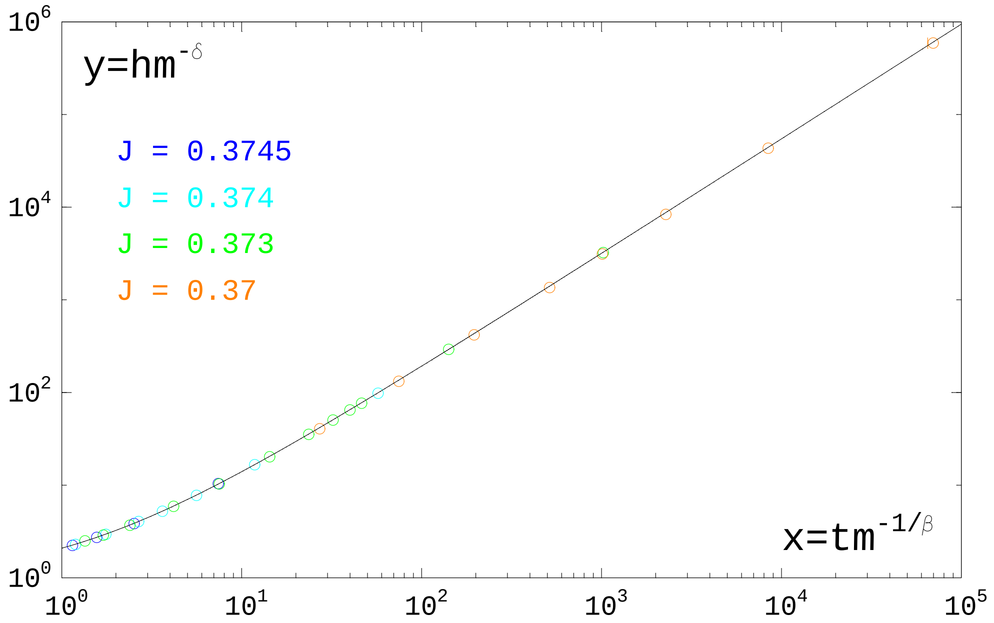

Abbildung 5.21: Widom-Griffiths-Zustandsgleichung in der heißen Phase für große x, doppeltlogarithmisch aufgetragen.

Zuletzt betrachten wir noch die Form $f_G(z)$ der Skalenfunktion im Vergleich zur Vorhersage. Mittels der Gleichungen

$$\begin{aligned} f_G(z) &= mh^{-\frac{1}{\delta}} = y^{-\frac{1}{\delta}}, \\ z &= th^{-\frac{1}{\beta\delta}} = xy^{-\frac{1}{\beta\delta}} \end{aligned} \tag{5.24}$$

kann diese aus der Widom-Griffiths-Form berechnet werden. Aus unseren anfänglichen Untersuchungen zum Eingrenzen des Skalenbereiches und dem Vergleich der beiden Darstellungsweisen kann davon ausgegangen werden, daß alle für die Abbildungen 5.18 bis 5.21 verwendeten Daten in dem $f_G(z)$-Skalenplot kaum sichtbare Abweichungen von der theoretischen Kurve aufweisen werden. Wie Abbildung 5.22 zeigt, bestätigt sich diese Vermutung. Lediglich einige wenige Daten bei $J = 0.37$ im Bereich mittlerer H-Felder weichen leicht nach oben ab.

Insgesamt bleibt festzustellen, daß die theoretische Vorhersage für die Zustandsgleichung der Magnetisierung durch unsere in dieser Arbeit numerisch bestimmten Ergebnisse gut bestätigt wird.

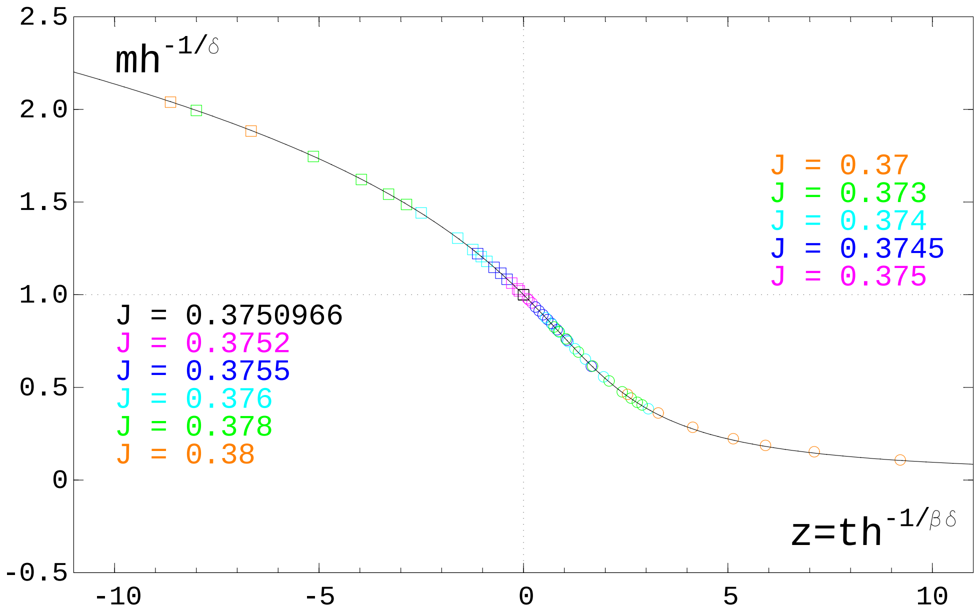

Abbildung 5.22: Die numerisch bestimmte Zustandsgleichung $f_G(z)$ im Vergleich zur theoretischen Vorhersage. Verwendet sind nur die Daten der jeweils größten Gitter gemäß Tabelle 5.5.

5.6 Zustandsgleichung der Suszeptibilität

Aus der Skalenfunktion $f_G(z)$ läßt sich, wie in Kapitel 3.1 beschrieben, die Zustandsgleichung

$$f_\chi(z) \;=\; \chi H_0 h^{1-\frac{1}{\delta}} \tag{5.25}$$

der Suszeptibilität ableiten. Dabei ist der explizite Zusammenhang zwischen den beiden Funktionen gegeben durch

$$f_\chi(z) \;=\; \frac{1}{\delta}\left(f_G(z) - \frac{z}{\beta} f_G'(z)\right). \tag{5.26}$$

Somit kann aus der theoretischen Vorhersage für $f_G(z)$ auch $f_\chi(z)$ bestimmt werden. Da die Suszeptibilität bei unseren Simulationen ebenfalls gemessen wurde, ist auch hier ein Vergleich mit der Theorie möglich.

Entsprechende Analysen der Suszeptibilität wie die der Magnetisierung im vorigen Kapitel zeigen, daß die Daten in der kalten Phase in einem Bereich $0.0001 \lesssim H \lesssim 0.001$ innerhalb der Fehler gut skalieren. Dabei kann das Kopplungsintervall sogar bis $J = 0.385$ ausgedehnt werden, obwohl für die Magnetisierung bei dieser Kopplung deutliche Abweichungen vom Skalenverhalten insbesondere in der Widom-Griffiths-Darstellung zu erkennen waren. Bei festem J ist wiederum ein mit zunehmendem H tendenzielles Abweichen nach oben zu beobachten, da sich Corrections to Scaling bemerkbar machen. Bei Annäherung an den kritischen Punkt scheint der H-Bereich, in welchem die Meßwerte skalieren, zu schrumpfen, so daß schon für kleine H-Felder (≈ 0.0004) keine Übereinstimmung mit der theoretischen Kurve vorliegt. Bei $z = 0$ entsprechen innerhalb ihrer Fehler nur die Daten bei $H = 0.0002$ und $H = 0.0003$ der zu erwartenden Normierung $f_\chi(0) = 1/\delta$, welche sich aus Gleichung (5.26) und der Normierung (3.9) $f_G(0) = 1$ herleitet. Differenzen beim Vergleich der theoretischen mit den numerischen Werten treten auch in der heißen Phase auf. Für kleine Felder H sind größere Finite-Size-Effekte als bei der Magnetisierung zu beobachten, so daß viele der vorliegenden Daten aufgrund nicht ausreichender Gittergröße nicht dem thermodynamischen Limes entsprechen. Mit zunehmendem H nimmt der Einfluß der L-Abhängigkeit zwar ab, jedoch erhöht sich der der Corrections to Scaling. Bei der Analyse des J-Bereiches, in welchen ein Skalenverhalten vorliegt, kann anhand unserer Meßwerte festgestellt werden, daß dies im Intervall $0.385 \gtrsim J \gtrsim 0.373$ zutrifft. Bei $J = 0.37$ kann aufgrund unserer Daten keine eindeutige Aussage mehr getroffen werden, da diese insbesondere bei kleinen Feldern finite-size-behaftet sind. Dieser Aspekt muß durch zukünftige genauere Rechnungen noch untersucht werden, da in der vorliegenden Arbeit hauptsächlich die Magnetisierung sowie die Korrelationslänge Gegenstand der Betrachtungen sind.

In Abbildung 5.23 ist nun die Zustandsgleichung der Suszeptibilität im Vergleich zur theoretisch ermittelten Kurve dargestellt. Wie schon beschrieben, ergibt sich in der kalten Phase eine gute Übereinstimmung sowie auch in der heißen Phase

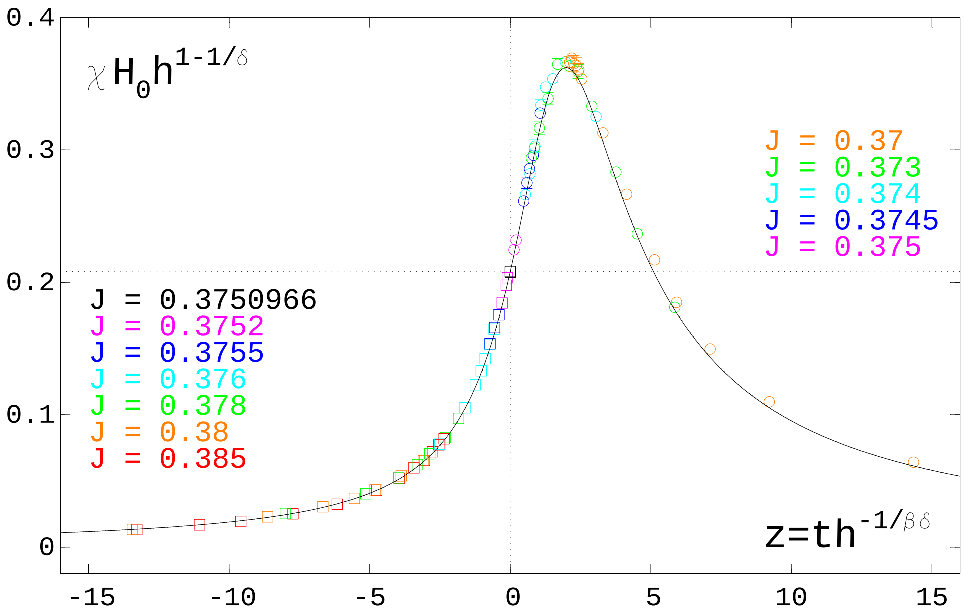

Abbildung 5.23: Die numerisch bestimmte Zustandsgleichung $f_\chi(z)$ im Vergleich zur theoretischen Vorhersage.

bei den Meßwerten, welche dem Limes unendlichen Volumens entsprechen. Weitere Simulationen sind im Bereich $z \approx 2$ nötig, um das sich ergebende Maximum der Skalenfunktion besser einzugrenzen. Aus den theoretischen Ergebnissen kann ein Maximum bei $z_\chi^{max} = 1.98(1)$ abgeschätzt werden.

Betrachten wir schließlich noch den Vergleich der beiden theoretisch bestimmten Zustandsgleichungen $f_G(z)$ und $f_\chi(z)$. Dabei fällt auf, daß diese Funktionen für große z nahezu identisch sind, wie man anhand von Abbildung 5.24 sehen kann. Ausgehend von dieser Beobachtung läßt sich daher näherungsweise der Ansatz

$$f_G(z) \;=\; f_\chi(z) \quad \text{für große } z \tag{5.27}$$

machen. Bei Berücksichtigung von Gleichung (5.26) ergibt sich somit die Differentialgleichung

$$\left(1 - \frac{1}{\delta}\right) f_G(z) \;=\; -\frac{z}{\beta\delta} f_G'(z), \tag{5.28}$$

welche mittels des Ansatzes

$$f_G(z) \;=\; cz^q \tag{5.29}$$

gelöst werden kann. Diese Funktion in die obige Differentialgleichung eingesetzt liefert eine Bestimmungsgleichung für den Exponenten q

$$\left(1 - \frac{1}{\delta}\right) cz^q \;=\; -\frac{z}{\beta\delta}\, cqz^{q-1}$$

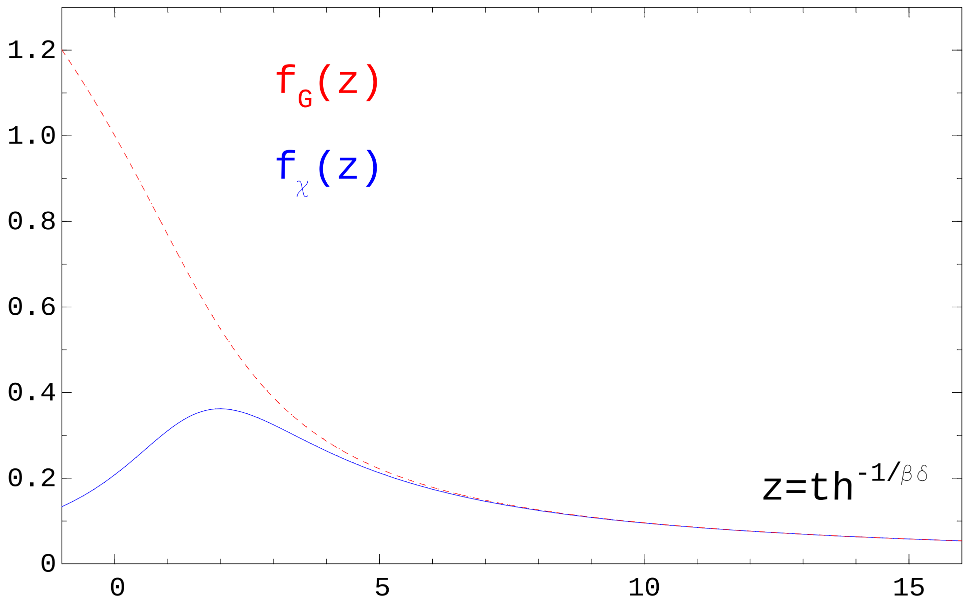

Abbildung 5.24: Vergleich der feldtheoretisch bestimmten Funktionen $f_G(z)$ und $f_\chi(z)$.

$$\Rightarrow \qquad q \;=\; \beta(1-\delta) \;=\; -\gamma. \tag{5.30}$$

Damit ergibt sich ein Abfall mit der Potenz γ

$$f_G(z) \;=\; cz^{-\gamma}. \tag{5.31}$$

Der noch zu bestimmende Faktor c kann durch Einsetzen der Parametrisierung in das Resultat (5.31) erhalten werden, wobei der Limes $z \to \infty$ zu berücksichtigen ist, welches $\theta \to 0$ entspricht. Andererseits muß sich Gleichung (5.31) für große z direkt aus der Parametrisierung ergeben, ohne den Vergleich mit f_χ heranzuziehen. Dazu betrachten wir f_G und z gemäß Gleichungen (5.24) und setzen für die Skalenvariablen x und y die Parametrisierung (3.43) in der Variablen θ ein.

$$f_G \;=\; \hat{h}(1)^{\frac{1}{\delta}}\hat{h}(\theta)^{-\frac{1}{\delta}}\theta \;=\; a\,\hat{h}(\theta)^{-\frac{1}{\delta}}\theta, \tag{5.32}$$

$$z \;=\; \frac{\theta_0^{\frac{1}{\beta}}}{\theta_0^2-1}\hat{h}(1)^{\frac{1}{\beta\delta}}(1-\theta^2)\hat{h}(\theta)^{-\frac{1}{\beta\delta}} \;=\; b\,(1-\theta^2)\hat{h}(\theta)^{-\frac{1}{\beta\delta}}. \tag{5.33}$$

Zur Vereinfachung sind die konstanten Faktoren in den Variablen $a = \hat{h}(1)^{1/\delta}$ und $b = \theta_0^{1/\beta}/(\theta_0^2-1)\,\hat{h}(1)^{1/\beta\delta}$ zusammengefaßt. Für den zu untersuchenden Grenzfall $\theta \to 0$ kann für die Funktion $\hat{h}(\theta)$ die Näherung $\hat{h}(\theta) \approx \theta$ gemacht werden. Bei weiterer Vernachlässigung des quadratischen Termes in Gleichung (5.33) ergibt sich somit für die Variable z

$$z \overset{\theta \lll 1}{=} b\,\theta^{-\frac{1}{\beta\delta}}. \tag{5.34}$$

Hiermit folgt für die entsprechende Näherung der Gleichung (5.32)

$$\begin{aligned} f_G &\stackrel{\theta \ll 1}{=} a\,\theta^{1-\frac{1}{\delta}} \\ &= ab^{\beta(\delta-1)} \left(b\theta^{-\frac{1}{\beta\delta}}\right)^{\beta(1-\delta)} \\ &= ab^{\gamma}\, z^{-\gamma}. \end{aligned} \tag{5.35}$$

Hiermit bestätigt sich das Verhalten (5.31) für große z, und für den obigen Faktor c erhält man $c = ab^{\gamma} = \hat{h}(1)\theta_0^{\gamma/\beta}(\theta_0^2 - 1)^{-\gamma}$.

5.7 Messung der Korrelationslängen

Wie bereits in Kapitel 1.4 erläutert, existieren mehrere Möglichkeiten, die Korrelationslänge ξ zu ermitteln. Daher sollen zunächst die verschiedenen Verfahren, die in dieser Arbeit untersucht wurden, noch einmal kurz aufgezeigt und anschließend miteinander verglichen werden.
Einerseits kann die Korrelationslänge mittels Gleichung (1.45) aus der Fouriertransformierten der Korrelationsfunktion und der Suszeptibilität berechnet werden

$$\xi^F = \left(\frac{\frac{\chi}{F} - 1}{4\sin^2\left(\frac{\pi}{L}\right)}\right)^{\frac{1}{2}}.$$

Andererseits läßt sich ξ mit der 2nd-Moment-Korrelationslänge abschätzen, wie sie in Gleichung (1.22)

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

definiert ist. Dabei wird für μ_0 der Wert der zuvor berechneten Suszeptibilität χ verwendet. Das zweite Moment μ_2 ermitteln wir gemäß Gleichung (1.33) wobei die Summation über $\bar{G}(\tau)$ abgebrochen wird, sobald die Korrelationsfunktion nicht mehr monoton fällt oder negativ wird. Dadurch wird vermieden, daß statistische Fluktuationen aufsummiert werden, welche insbesondere für große Abstände durch den Faktor τ^2 ein großes Gewicht erhalten.
Ein drittes Verfahren besteht darin, eine effektive Korrelationslänge mittels der Korrelationsfunktion über

$$\xi^{eff}(\tau, \Delta) = \frac{\Delta}{\ln \bar{G}(\tau) - \ln \bar{G}(\tau + \Delta)} \tag{5.36}$$

gemäß Gleichung (1.20) zu ermitteln. Diese Methode erwies sich aber in den meisten Fällen als nicht anwendbar, da sich für verschiedene τ und Δ sehr unterschiedliche

Werte für ξ^{eff} ergaben. Nur bei sehr großen Gitterlängen L und großen Korrelationslängen, jedoch deutlich kleiner als $L/2$, ließ sich ξ^{eff} abschätzen, allerdings mit einem im Vergleich zu den anderen Methoden großen Fehler. Daher soll dieses Verfahren hier nicht weiter betrachtet werden.
Als eine vierte Vorgehensweise kann schließlich die Korrelationsfunktion $\bar{G}(\tau)$ mit dem Ansatz

$$\bar{G}(\tau) \;=\; A\left(\exp\left(-\frac{\tau}{\xi^{Fit}}\right) + \exp\left(-\frac{L-\tau}{\xi^{Fit}}\right)\right) \qquad (5.37)$$

entsprechend Gleichung (1.21) mit der Amplitude A und der Korrelationslänge ξ^{Fit} als Parameter gefittet werden. Zu diesem Zweck betrachten wir die Korrelationsfunktion im folgenden näher.
Als Beispiel für den exponentiellen Abfall von $\bar{G}(\tau)$ ist die Korrelationsfunktion für verschiedene Gitterlängen bei der kritischen Kopplung und dem Feld $H = 0.0003$ in Abbildung 5.25 dargestellt. Man erkennt, daß die beiden Funktionen für $L = 72$ und 96 identisch sind mit Ausnahme großer Abstände $\tau \gtrsim 30$, bei denen $\bar{G}(\tau)$ für $L = 72$ nach oben abweicht. Die Korrelationsfunktion des 48er Gitters weist zwar generell leicht höhere Werte auf, die Abweichung nach oben wächst jedoch auch hier für große τ. Dies verdeutlicht die Notwendigkeit der Berücksichtigung der periodischen Randbedingungen im Ansatz (5.37). Die Korrelationsfunktionen der kleineren Gitter weisen im Vergleich zu den größeren für große Abstände einen schwächeren Abfall auf und liefern somit höhere Werte, da zu $\bar{G}(\tau)$ auch $\bar{G}(L-\tau)$ beiträgt.

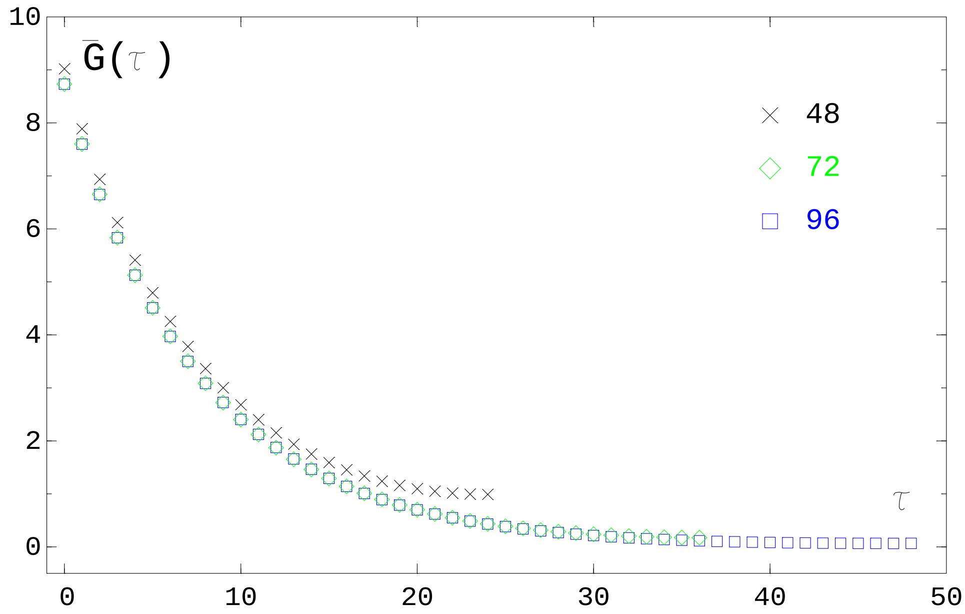

Abbildung 5.25: $\bar{G}(\tau)$ bei $T = T_c$ und $H = 0.0003$ für die Gitterlängen $L = 48$, 72 und 96.

Dieser Effekt tritt insbesondere bei großen Korrelationslängen und kleinen Gittern auf. In unserem betrachteten Fall ergibt sich eine Korrelationslänge von $\xi \approx 8$, die selbst bei einem Gitter der Ausdehnung $L = 72$ die periodischen Randbedingungen sichtbar werden läßt. Die Beobachtung, daß die Korrelationsfunktion des 48er Gitters im Vergleich zu denen der größeren Gitter im gesamten Bereich zu groß ist, läßt einen weiteren Finite-Size-Effekt deutlich werden. Dies kann mit einer finite-size-behafteten Magnetisierung erklärt werden. Da für $L = 48$ die Magnetisierung m kleiner als der Wert im thermodynamischen Limes ist (vgl. Kapitel 5.2), wird bei der Berechnung des zusammenhängenden Anteils der Korrelationsfunktion durch Subtraktion von m^2 ein zu kleiner Wert abgezogen, so daß sich ein zu großes $\bar{G}(\tau)$ ergibt.

Weitaus deutlicher ist das Verhalten beim Vergleich von Gittern mit $L = 24$ und $L = 48$. Als Beispiel hierfür ist $\bar{G}(\tau)$ bei $J = 0.38$ und $H = 0.0004$ in Abbildung 5.26 dargestellt. Betrachten wir zunächst die mit dem Ordnungsparameter m berechneten Korrelationsfunktionen. Man erkennt eine ausgeprägte L-Abhängigkeit, die Funktion für $L = 24$ fällt im Gegensatz zu der mit $L = 48$ nicht annähernd auf null ab. Ermittelt man statt dessen $\bar{G}(\tau)$ mit Hilfe der gemäß Gleichung (5.1) definierten Magnetisierung m^*, so fällt diese Funktion ungefähr mit der des 48er Gitters zusammen. Der Finite-Size-Effekt wird somit reduziert, ist allerdings noch

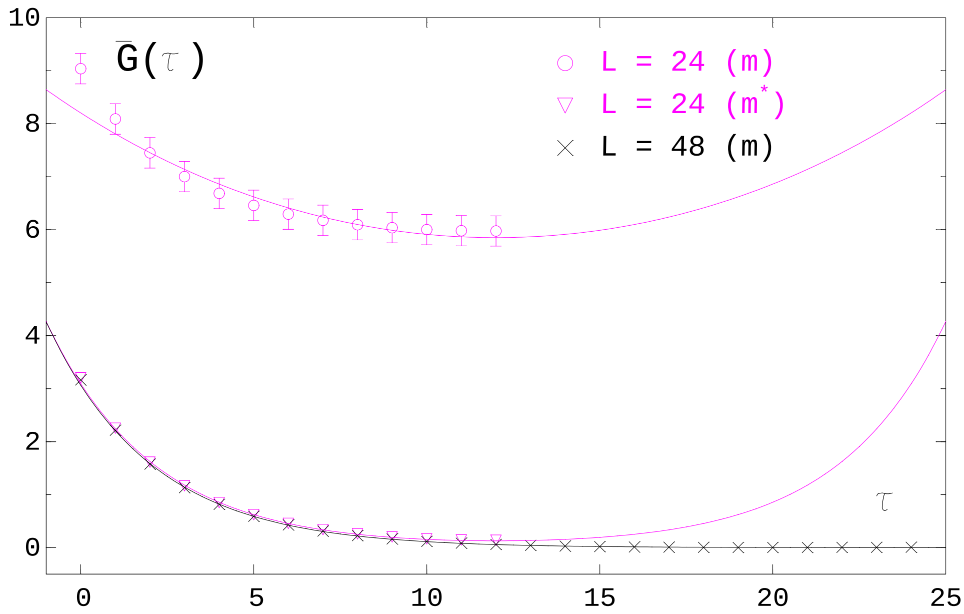

Abbildung 5.26: $\bar{G}(\tau)$ bei $J = 0.38$ und $H = 0.0004$ für die Gitterlängen $L = 24$ und 48. Bei $L = 24$ wurde zum einen bei der Berechnung von $\bar{G}(\tau)$ der Ordnungsparameter m benutzt, zum anderen m^*, wie in Gleichung (5.1) definiert. Die durchgezogenen Linien geben die Resultate der Fits der Daten mit Gleichung 5.37 wieder.

L, Ordnungsparameter	24, m	24, m^*	48, m	72, m
ξ^F	13.6(3)	3.12(5)	3.0(1)	3.1(3)
ξ^{Fit}	13.8(9)	3.11(2)	3.03(1)	3.028(1)

Tabelle 5.6: ξ^F und ξ^{Fit} bei $J = 0.38$ und $H = 0.0004$ bei verschiedenen Gitterlängen L sowie unterschiedlichen Ordnungsparametern m und m^*.

immer vorhanden. Es ergibt sich eine interessante Beobachtung, vergleicht man die Korrelationslängen ξ^F und ξ^{Fit}. Dabei wurde zunächst zur Berechnung von ξ^{Fit} das vollständige τ-Intervall [1,$L/2$] benutzt. Eine genauere Untersuchung der Abhängigkeit vom τ-Fit-Intervall folgt weiter unten in diesem Kapitel. Obwohl ein Fit von $\bar{G}(\tau)$ (bei $L = 24, m$) mit dem Ansatz (5.37) nicht vernünftig erscheint, stimmt der so erhaltenen Wert ξ^{Fit} mit dem von ξ^F im Rahmen der Fehler überein. Beide Verfahren liefern somit aus den gleichen Daten gleiche Resultate. Tabelle 5.6 zeigt die Ergebnisse, wobei das aus Gründen der Übersichtlichkeit in Abbildung 5.26 nicht gezeigte 72er Gitter mit aufgelistet ist. Durch Verwendung von m^* bei $L = 24$, wobei im Fall von ξ^F m^* in die Berechnung der Suszeptibilität einfließt, nähert sich ξ dem thermodynamischen Limes, welcher bei $L = 48$ und 72 erreicht ist. Der beschriebene Effekt tritt nur bei $T \leq T_c$, kleinen Gittern und kleinen Feldern H auf, so daß hier die Verwendung von m^* sinnvoll ist. Bei ausreichend großen Gitterlängen L jedoch, bei denen die Korrelationslänge als finite-size-frei angenommen werden kann, ist die Magnetisierung ausschließlich im positiven Bereich verteilt, so daß m und m^* identische Resultate liefern. Da in die Bestimmung der Zustandsgleichung der Korrelationslänge nur solche Gittergrößen einfließen, kann somit hier der Ordnungsparameter m benutzt werden.

Wie schon angedeutet, stellt sich die Frage, welcher Bereich bei der Berechnung von ξ^{Fit} zum Fit mit der Funktion (5.37) herangezogen werden soll. Die Variation der oberen Grenze τ_{max} des Intervalls hat im wesentlichen keinen Einfluß auf das Ergebnis. Tragen neben der zu schätzenden exponentiellen Korrelationslänge höhere Zustände, d. h. kleinere Korrelationslängen bei, so wirkt sich dies im vorderen Bereich bei kleinem τ aus. Daher untersuchen wir ξ^{Fit} auch in Abhängigkeit der unteren Grenze τ_{min}. Bei Änderung von τ_{min} stellt sich heraus, daß mit wachsendem τ_{min} die Korrelationslänge meistens leicht ansteigt, oder, insbesondere in der heißen Phase, im Rahmen der Fehler konstant bleibt, während der Fehler zunimmt. Das χ^2/dof sinkt dabei und nimmt Werte kleiner als eins an. Selbst bei $\tau_{min} = 1$ ergibt sich überwiegend $\chi^2/dof < 1$, selten $\gtrsim 1$. Ein großer Einfluß eventueller höherer Zustände ist nicht zu erkennen. Im Vergleich hierzu zeigte sich in Ref. [1] im O(4)-Modell eine deutlichere Abhängigkeit der Korrelationslänge von τ_{min}, welches zwischen eins und fünf variiert wurde. Wir beschränken uns im folgenden auf den Bereich $\tau_{min} = 1, 2, 3$, da in unserem Modell vielfach kleine Korrelationslängen von $\xi \approx$ zwei bis vier auftreten, d. h. die Korrelationsfunktion sehr schnell abfällt,

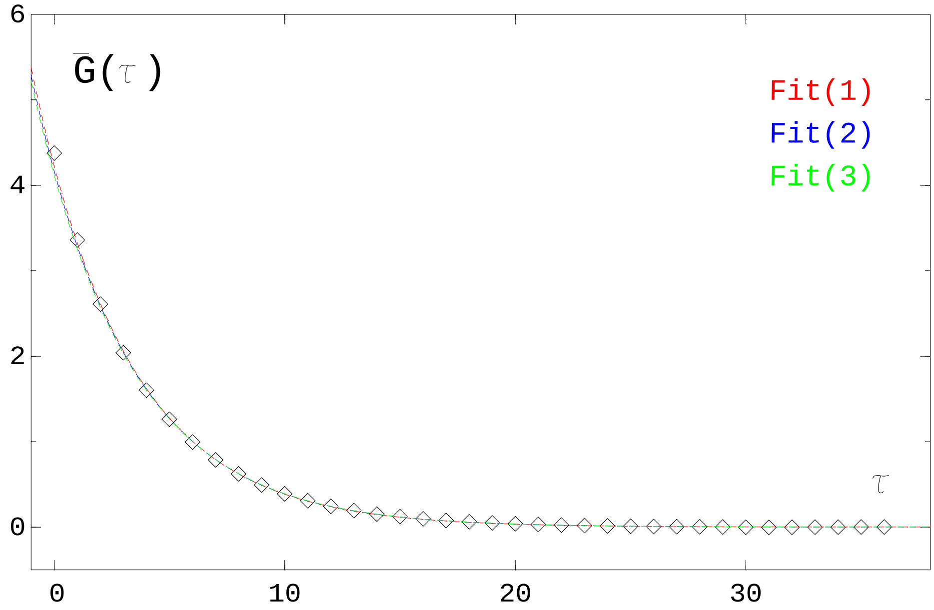

Abbildung 5.27: $\bar{G}(\tau)$ bei $J = 0.378$, $H = 0.0002$ und $L = 72$. Eingezeichnet sind die Fit-Ergebnisse bei Variation des Fit-Intervalls. In Klammern ist die untere Grenze τ_{min} angegeben, die obere Grenze τ_{max} beträgt jeweils $L/2 = 36$.

τ_{min}	ξ^{Fit}	χ^2/dof
1	4.175(14)	0.80
2	4.216(17)	0.32
3	4.244(21)	0.17

Tabelle 5.7: ξ^{Fit} bei $J = 0.378$, $H = 0.0002$ und $L = 72$ in Abhängigkeit von τ_{min}.

und daher insbesondere bei kleinen Gitterlängen von $L = 24$ nur wenig Meßwerte für einen Fit bei höherem τ_{min} übrig bleiben. Zur Veranschauung unserer Analysen zeigt Abbildung 5.27 die Korrelationsfunktion bei $J = 0.378$, $H = 0.0002$ und $L = 72$. Eingezeichnet sind zudem die Resultate der Fits mit $\tau_{min} = 1, 2, 3$ und $\tau_{max} = L/2$. Man erkennt im vorderen Bereich leichte Unterschiede, die sich auf den Wert von ξ^{Fit} auswirken, wie in Tabelle 5.7 dargestellt. Die Variation in ξ^{Fit} ist im allgemeinen geringer als in diesem Beispiel. Der Vergleich mit ξ^F zeigt, daß alle drei Werte innerhalb des Fehlers von $\xi^F = 4.17(19)$ liegen. Untersuchungen bei anderen Kopplungen, H-Feldern und Gitterlängen bestätigen dieses Verhalten.
Betrachten wir dazu zunächst die Korrelationslängen in der heißen Phase am Beispiel $J = 0.373$ und $L = 48$, wie in Abbildung 5.28 dargestellt. Eingezeichnet ist außerdem ein Spline durch die $\xi^{Fit}(\tau_{min} = 1)$-Werte, um den Verlauf der Funktion

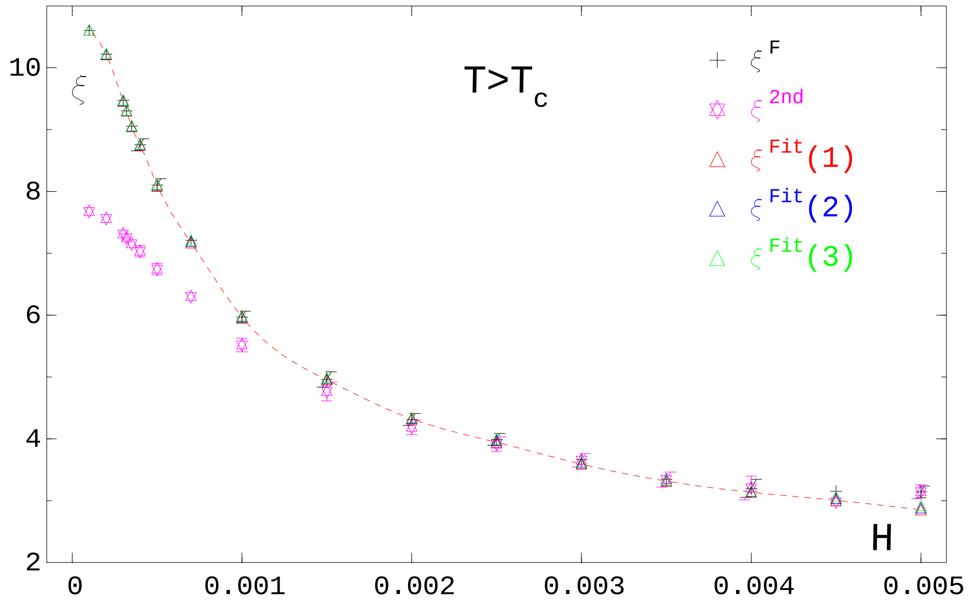

Abbildung 5.28: Das mit den verschiedenen Methoden bestimmte ξ bei $J = 0.373$ und $L = 48$ in Abhängigkeit von H. Bei ξ^{Fit} ist in Klammern τ_{min} angegeben. Die $\xi^{Fit}(1)$-Daten sind, wie auch in den Abbildungen 5.29 und 5.30, durch einen Spline verbunden.

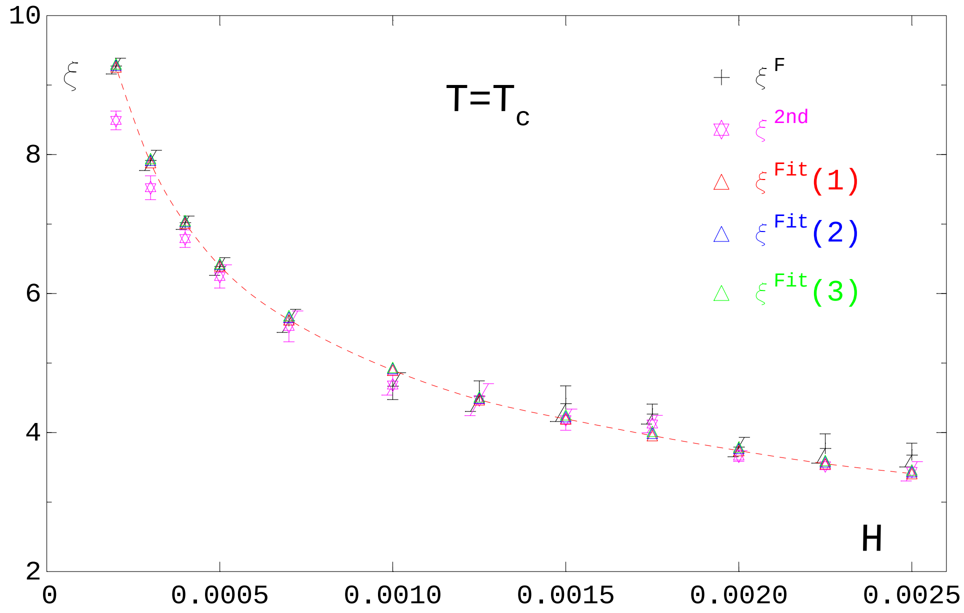

Abbildung 5.29: ξ bei $J = J_c$ und $L = 72$ in Abhängigkeit von H.

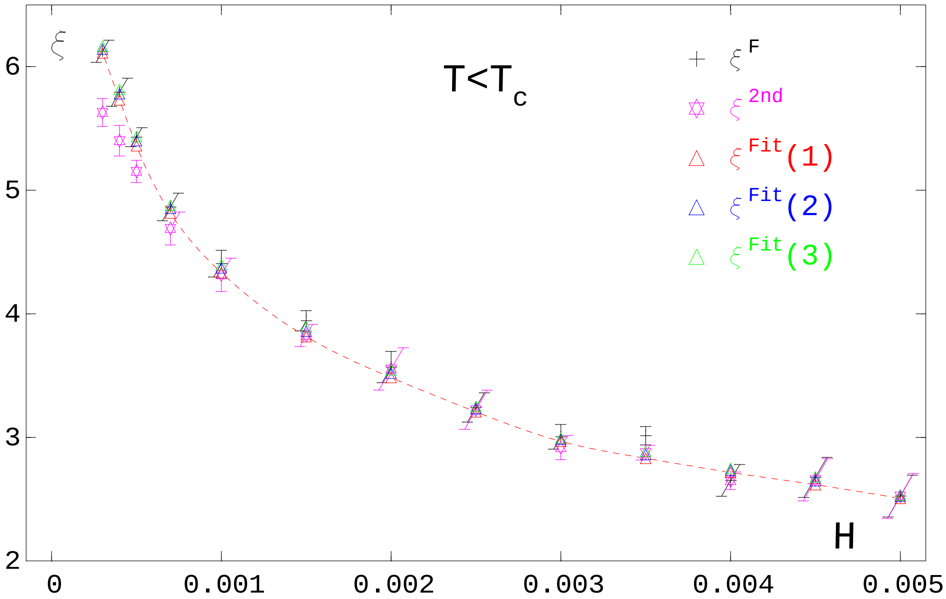

Abbildung 5.30: ξ bei $J = 0.376$ und $L = 48$ in Abhängigkeit von H.

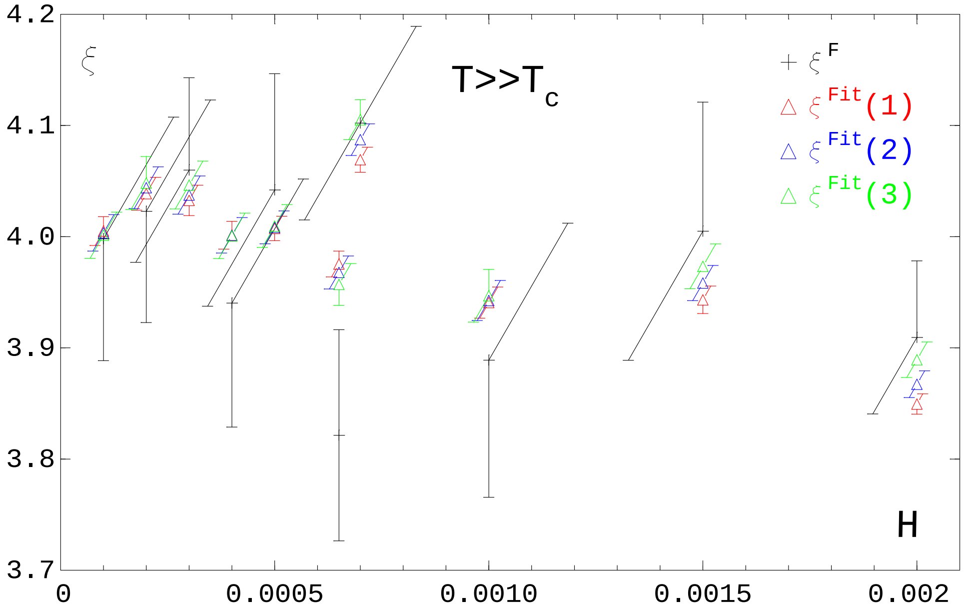

Abbildung 5.31: ξ bei $J = 0.365$ und $L = 48$ in Abhängigkeit von H. Die kleinen Skalen in ξ und H ermöglichen den besseren Vergleich der Fehler.

$\xi(H)$ zu verdeutlichen. Zudem liefern die $\xi^{Fit}(1)$-Daten im Vergleich zu den anderen die glatteste Kurve, und leichte Abweichungen der ξ^F- und ξ^{2nd}-Werte werden besser sichtbar. Die Abbildung zeigt, daß ξ^F sowie die drei Werte von ξ^{Fit} nahezu identisch sind. Lediglich für sehr große H-Felder weicht ξ^F zusammen mit ξ^{2nd} nach oben ab. Diese Verfahren liefern hier offenbar falsche Werte, da die Korrelationslänge bei wachsendem H sinken sollte, im Grenzfall $H \to \infty$ ergibt sich $\xi = 0$. ξ^{Fit} fällt dagegen monoton. Während ξ^{2nd} im Bereich großer Felder mit den Ergebnissen der anderen Methoden übereinstimmt, weicht diese Korrelationslänge bei kleinem H deutlich nach unten ab. Dieses Verhalten ist generell zu beobachten. Eine entsprechende Graphik zeigt Abbildung 5.29 für $J = J_c$ $(L = 72)$, und Abbildung 5.30 stellt repräsentativ bei $J = 0.376$ $(L = 48)$ die kalte Phase dar. ξ^F und ξ^{Fit} liegen in der Regel im Rahmen der Fehler aufeinander. Allerdings müssen wir davon ausgehen, daß die Fehler der Fit-Werte unterschätzt sind. Einerseits berücksichtigt der Fehler bei festem τ_{min} nicht die Variation von ξ^{Fit} bei variabler unterer Grenze, und andererseits liefert ξ^{Fit} zwar glattere Kurven als ξ^F, jedoch sind auch diese bei genauerer Betrachtung im Rahmen der kleinen Fehler nicht stetig. Dies zeigt Abbildung 5.31, welche die Korrelationslängen ξ^F und ξ^{Fit} im Vergleich bei $J = 0.365$ und kleinen Feldern darstellt. Dennoch weist ξ^{Fit} die geringsten statistischen Schwankungen als Funktion von H auf, weshalb sich diese Methode für die weiteren Betrachtungen anbietet. Innerhalb dieses Fit-Verfahrens unterscheiden sich $\xi^{Fit}(1)$, $\xi^{Fit}(2)$ und $\xi^{Fit}(3)$ wie oben gesehen im wesentlichen nur innerhalb der schon kleinen Fehlerbalken, jedoch liefert $\xi^{Fit}(1)$ die kleinsten Schwankungen und damit die glatteste Kurve. Erhöht man die untere Fit-Grenze auch über $\tau_{min} = 3$ hinaus, so ergibt sich kein Plateau für ξ^{Fit}, und die statistischen Schwankungen zwischen verschiedenen H-Werten werden größer. Aufgrund dieser Analysen wird im folgenden die Korrelationslänge mittels $\xi^{Fit}(\tau_{min} = 1)$ berechnet und diese zur Vereinfachung nur mit ξ bezeichnet.

5.8 Zustandsgleichung der Korrelationslänge

Bevor letztendlich die Zustandsgleichung der Korrelationslänge im Isingmodell numerisch bestimmt wird, sollen hier zunächst einige allgemeine Analysen zur Korrelationslänge in der kalten und heißen Phase sowie bei $t = 0$ angestellt werden.

Betrachten wir zunächst die Korrelationslänge auf der kritischen Isotherme. Abbildung 5.32 zeigt ξ in Abhängigkeit von H für die verschiedenen Gittergrößen. Während bei großen Feldern die Meßwerte für unterschiedliche L aufeinander liegen, werden bei kleinem H die Finite-Size-Effekte deutlicher. Der thermodynamische Limes ist hinreichend genau bei den jeweils größten Gittern für $H \geq 0.0002$ erreicht. Bei $H = 0.0001$ sind die statistischen Schwankungen jedoch so groß, daß $\xi(L = 120)$

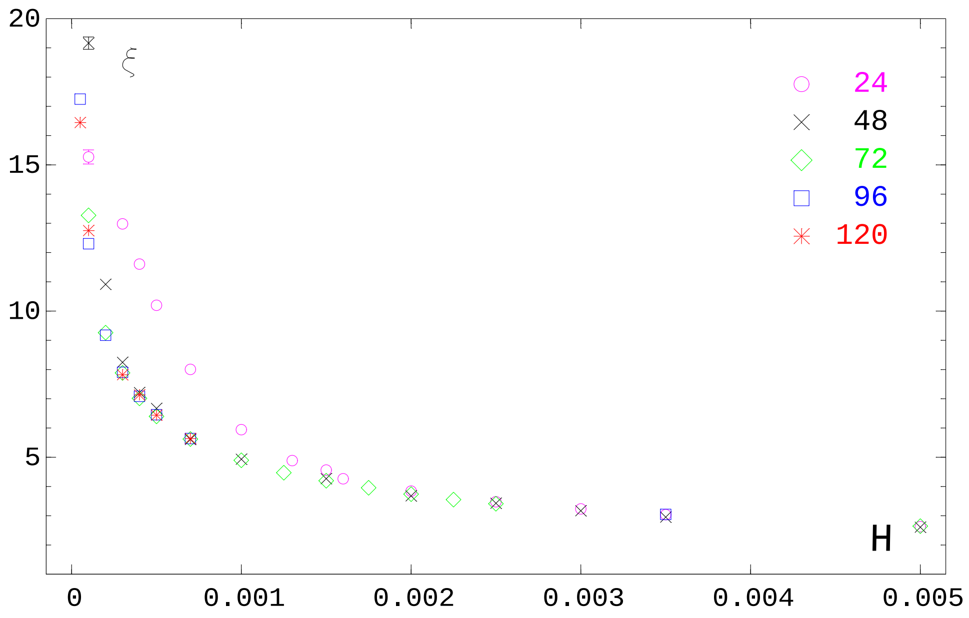

Abbildung 5.32: $\xi(H)$ bei $J = J_c$ für verschiedene Gitterlängen L.

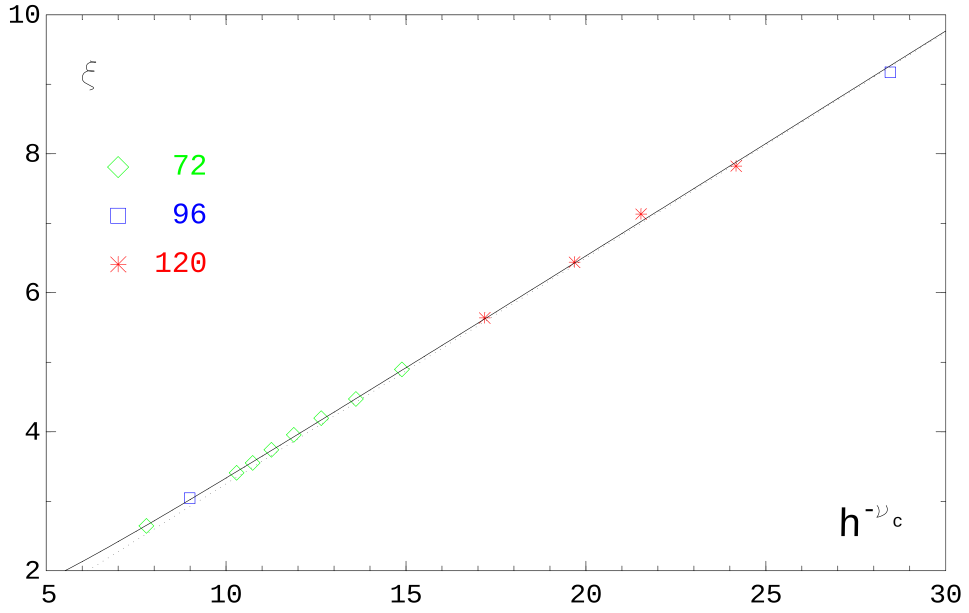

Abbildung 5.33: Die für den Fit benutzten Daten ξ in Abhängigkeit von $h^{-\nu_c}$ bei $J = J_c$. Die durchgezogene Kurve gibt das Fit-Ergebnis $\xi = 0.325\, h^{-\nu_c}(1 + 8\, h)$ wieder, die gestrichelte Gerade nur den führenden Term.

sogar über dem Wert von $\xi(L=96)$ liegt. Dies hebt noch einmal das Unterschätzen der Fehler hervor. Bei den folgenden Analysen wird das nicht normierte Feld H verwendet, wenn lediglich die Abhängigkeit $\xi(H)$ dargestellt werden soll, ansonsten wird die normierte Größe h benutzt.
Die Korrelationslänge sollte sich am kritischen Punkt gemäß Gleichung (2.9) bei Vernachlässigung von Korrekturen wie

$$\xi \;=\; \xi^c h^{-\nu_c} \tag{5.38}$$

bzw. mit deren Berücksichtigung wie

$$\xi \;=\; \xi^c h^{-\nu_c}\left(1 + c_1 h^{\omega\nu_c} + c_2 h\right) \tag{5.39}$$

verhalten. Die Amplitude ξ^c entspricht dem Wert der Zustandsgleichung $g_\xi(z)$ bei $z=0$ ($t=0$). Daher bietet sich ein Fit der Daten mit der Funktion (5.38) oder (5.39) an, um $g_\xi(0)$ zu bestimmen. Verwendet wurden dabei die Meßwerte der jeweils größten Gitter mit $L \geq 72$ im H-Intervall [0.0002,0.005]. Es stellt sich heraus, daß ähnlich wie bei den Fits zur Bestimmung von T_0 und H_0 in den vorigen Kapiteln die Korrektur c_2 für große H notwendig wird und gegenüber dem Faktor c_1 überwiegt. Das χ^2/dof bewegt sich bei Variation der Fit-Grenzen, wahrscheinlich aufgrund der geringen Fehler des Berechnungsverfahrens der Korrelationslänge, in Größenordnungen von 10 bis 60. Für die Amplitude ξ^c läßt sich beim Fit mit Gleichung (5.38) unter Berücksichtigung kleiner H-Felder, wo Corrections to Scaling vernachlässigbar sind, ein Wert von $\xi^c \approx 0.326$ abschätzen. Bei Hinzunahme der Korrektur c_2 erhält man $\xi^c \approx 0.325$ mit $c_2 \approx 8$ im Bereich eines größeren Intervalls. Abbildung 5.33 zeigt ξ aufgetragen gegenüber $h^{-\nu_c}$ mit der Funktion $\xi = 0.325\, h^{-\nu_c}(1+8\,h)$ sowie dem führenden Term. Um einen zusätzlichen Eindruck vom Skalenverhalten der Daten für die verschiedenen Gitter zu erhalten, betrachten wir die Finite-Size-Skalenfunktion Q_ξ bei $t=0$

$$\frac{\xi}{L} \;=\; Q_\xi\left(hL^{\frac{1}{\nu_c}}\right) \;=\; Q_\xi\left(x_h\right) \tag{5.40}$$

mit $x_h = hL^{1/\nu_c}$. Diese ist in Abbildung 5.34 aufgetragen. Wie zu sehen ist, skalieren die Meßwerte in dieser Darstellungsweise gut. Um die bis jetzt nur ungenau abgeschätzte Amplitude ξ^c eventuell besser zu bestimmen, liegt eine Betrachtung der Amplitudenfunktion

$$A_\xi^h \;=\; x_h^{\nu_c}\, Q_\xi\left(x_h\right) \tag{5.41}$$

nahe, welche bei festem kleinem Feld h im Limes unendlichen Volumens gegen das gesuchte ξ^c konvergiert

$$\xi^c \;=\; \lim_{x_h\to\infty} A_\xi^h\left(x_h\right). \tag{5.42}$$

Abbildung 5.35 zeigt die Funktion $A_\xi^h = x_h^{\nu_c}\xi/L = \xi h^{\nu_c}$ aufgetragen gegenüber x_h. Es ergibt sich für große L in guter Näherung ein Plateau, und die relativen Abweichungen bei kleinem L sind weitaus geringer als bei den entsprechenden Funktionen A_m^H und A_m^T der Magnetisierung, wie in den Kapiteln 5.3 und 5.4 untersucht (vgl.

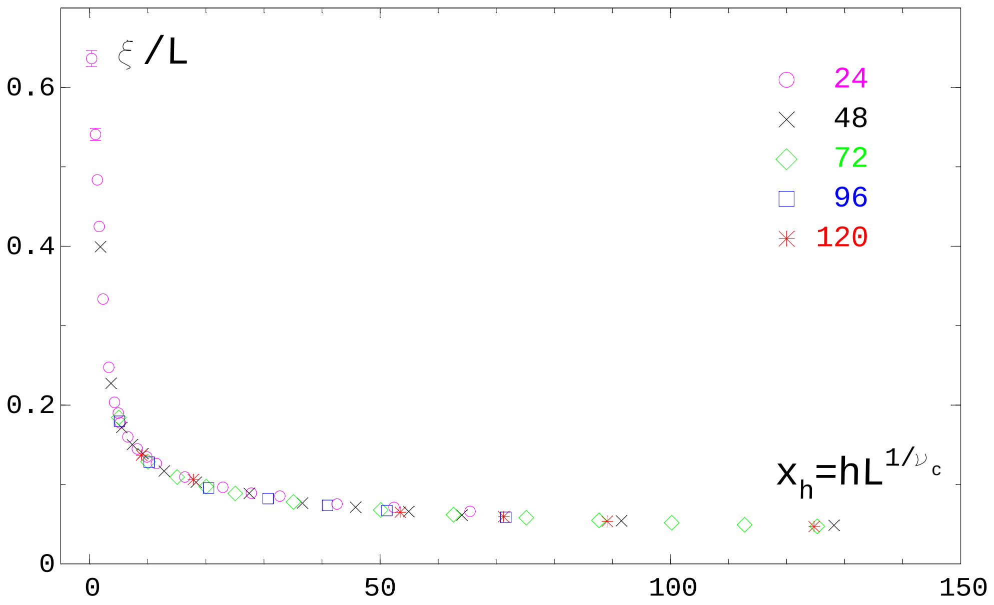

Abbildung 5.34: Finite-Size-Skalenfunktion Q_ξ bei $t = 0$.

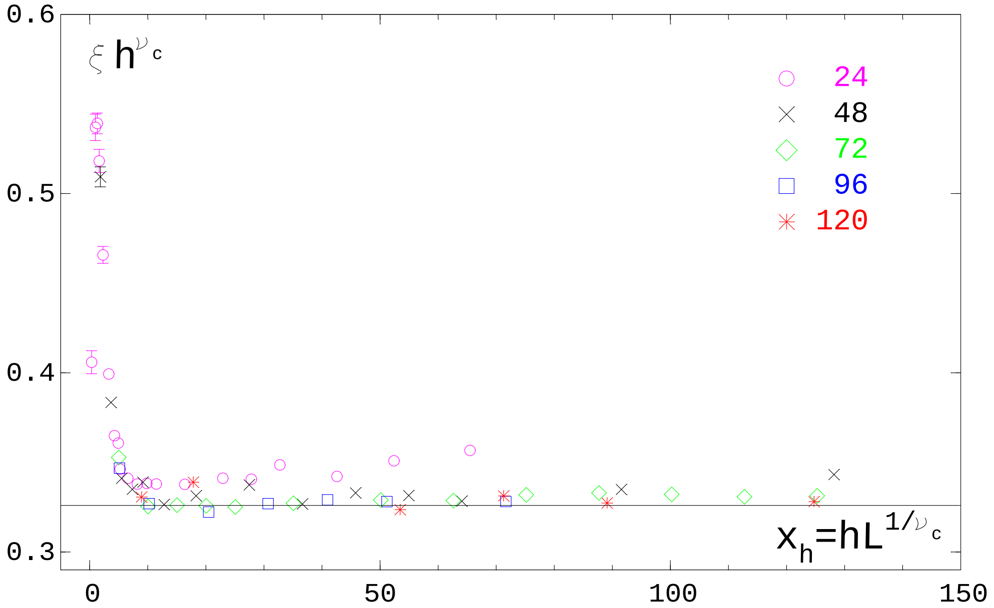

Abbildung 5.35: Amplitudenfunktion $A^h_\xi(x_h)$. Die horizontale Gerade gibt das Fit-Ergebis $\xi^c = 0.326$ wieder.

L	x_h-Intervall
72	10 - 25
96	10 - 72
120	53 - 125

Tabelle 5.8: Fit-Bereich der Daten aus Abbildung 5.35 zur ξ^c-Bestimmung.

Abbildungen 5.12 und 5.15). Aus einem Konstanten-Fit mit den Daten gemäß Tabelle 5.8, welche das Plateau bilden, resultiert $\xi^c = 0.3266(7)$. Dieses Ergebnis ist ebenfalls in Abbildung 5.35 eingezeichnet. Unter Berücksichtigung der zuvor gewonnenen Werte einschließlich derer Schwankungen bei Variation des Fit-Intervalls läßt sich schließlich eine Amplitude von $\xi^c = 0.326(1)$ abschätzen.
In der kalten Phase wurde zunächst bei den Kopplungen $J = 0.385$, 0.38, 0,376 und 0.378 simuliert. Dabei wurden Gitter der Ausdehnung $L = 24$ bis 96 benutzt. Um einen Eindruck über das Verhalten von ξ zu gewinnen, zeigt Abbildung 5.36 die Korrelationslänge in Abhängigkeit von H. Bei den beiden größten untersuchten Kopplungen bleibt ξ im gesamten H-Bereich in der Größenordnung weniger Gittereinheiten. Mit abnehmendem Feld steigt ξ leicht an. Nur bei $L = 24$ wird ein Finite-Size-Effekt deutlich. Bei dieser Gittergröße wurde bei der Kopplung $J = 0.385$ für $H \leq 0.0007$ und bei $J = 0.38$ für $H \leq 0.001$ der Parameter m^* verwendet, da die Magnetisierungsverteilung sich hierbei auch in den negativen Bereich erstreckt. Nähert man sich mit J der kritischen Kopplung, so wird der Anstieg der Korrelationslänge mit sinkendem H größer. Die Kurve nähert sich dem Verhalten $\xi \sim H^{-\nu_c}$, welches bei $J = J_c$ vorliegt, von unten.
Im Gegensatz hierzu betrachten wir die Abbildung 5.37, welche die heiße Phase bei den Kopplungen $J = 0.365$, 0.37, 0.373 und 0.374 darstellt. Auch hier bewegt sich die Korrelationslänge bei der kleinsten verwendeten Kopplung in Bereich einiger Gittereinheiten, nimmt aber größere Werte an als bei der vergleichbaren Kopplung $J = 0.385$ in der kalten Phase. Für große H-Felder nimmt ξ bei Annäherung an die kritische Kopplung ab, während ξ bei kleinem H ansteigt. Im Grenzfall $H = 0$ bleibt die Korrelationslänge jedoch endlich, was durch das Abknicken der Kurve im vorderen Bereich nach unten deutlich wird. Wie zu erkennen, nähern sich die Daten in der symmetrischen Phase dem Verhalten $\xi \sim H^{-\nu_c}$ bei $J = J_c$ von oben.
Nicht eingezeichnet in die Abbildungen 5.36 und 5.37 sind die Meßdaten bei den Kopplungen $J = 0.3755$, 0.3752, 0.375 und 0.3745, da hier nur einige wenige Werte vorliegen. Diese Daten wurden in erster Linie für die Skalenfunktion der Magnetisierung berechnet, sie können jedoch auch für die Skalenfunktion der Korrelationslänge herangezogen werden. Es ist allerdings fraglich, ob die ξ-Werte dem thermodynamischen Limes entsprechen, da bei nur jeweils einer Gittergröße simuliert wurde.

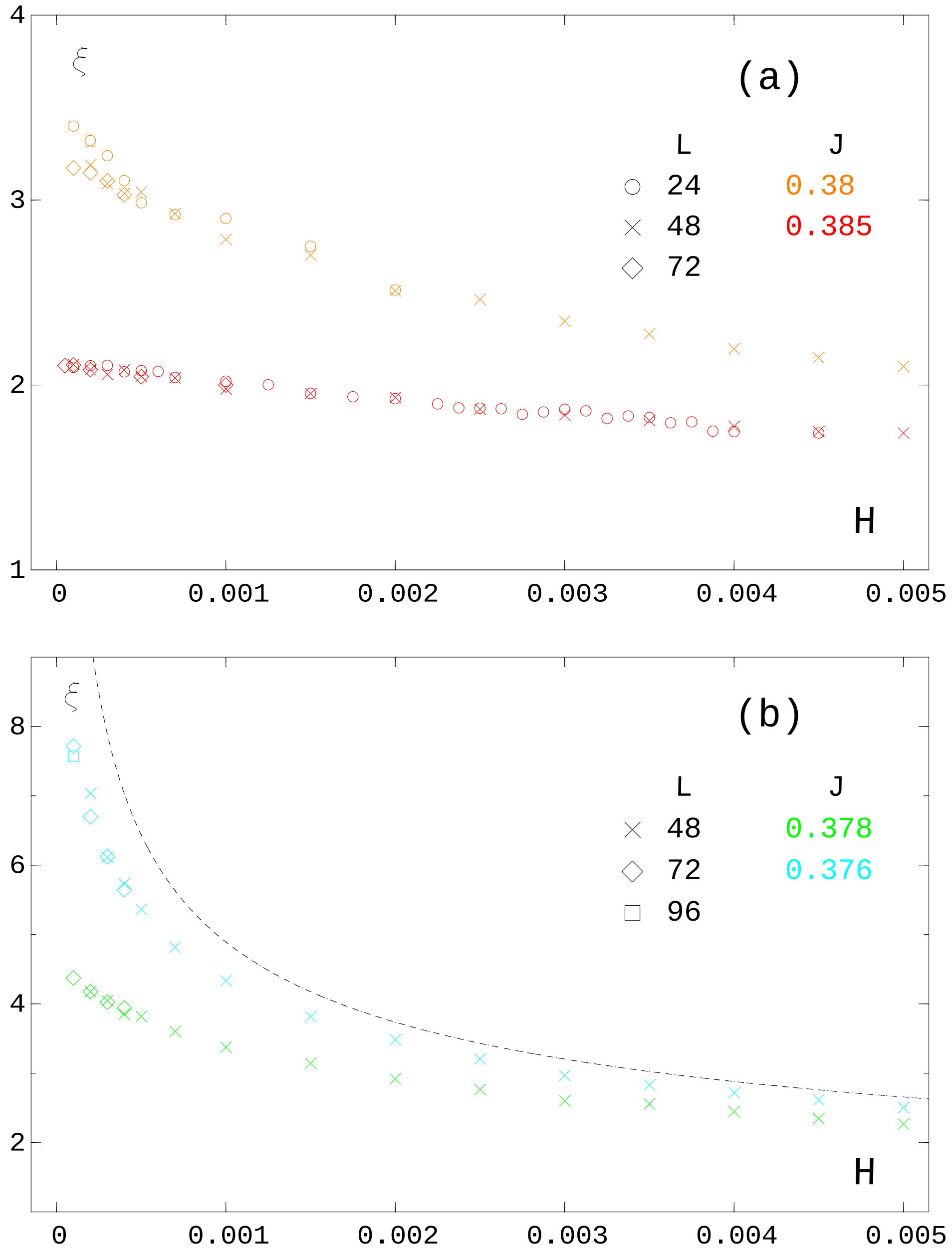

Abbildung 5.36: $\xi(H)$ in der kalten Phase bei den Kopplungen $J = 0.38$ und 0.385 (a) sowie bei $J = 0.376$ und 0.378 (b) für verschiedene Gitterlängen L. Die gestrichelte Kurve in Teil (b) deutet den Verlauf der Funktion $\xi = 0.325\, h^{-\nu_c}(1 + 8\, h)$ bei $J = J_c$ an.

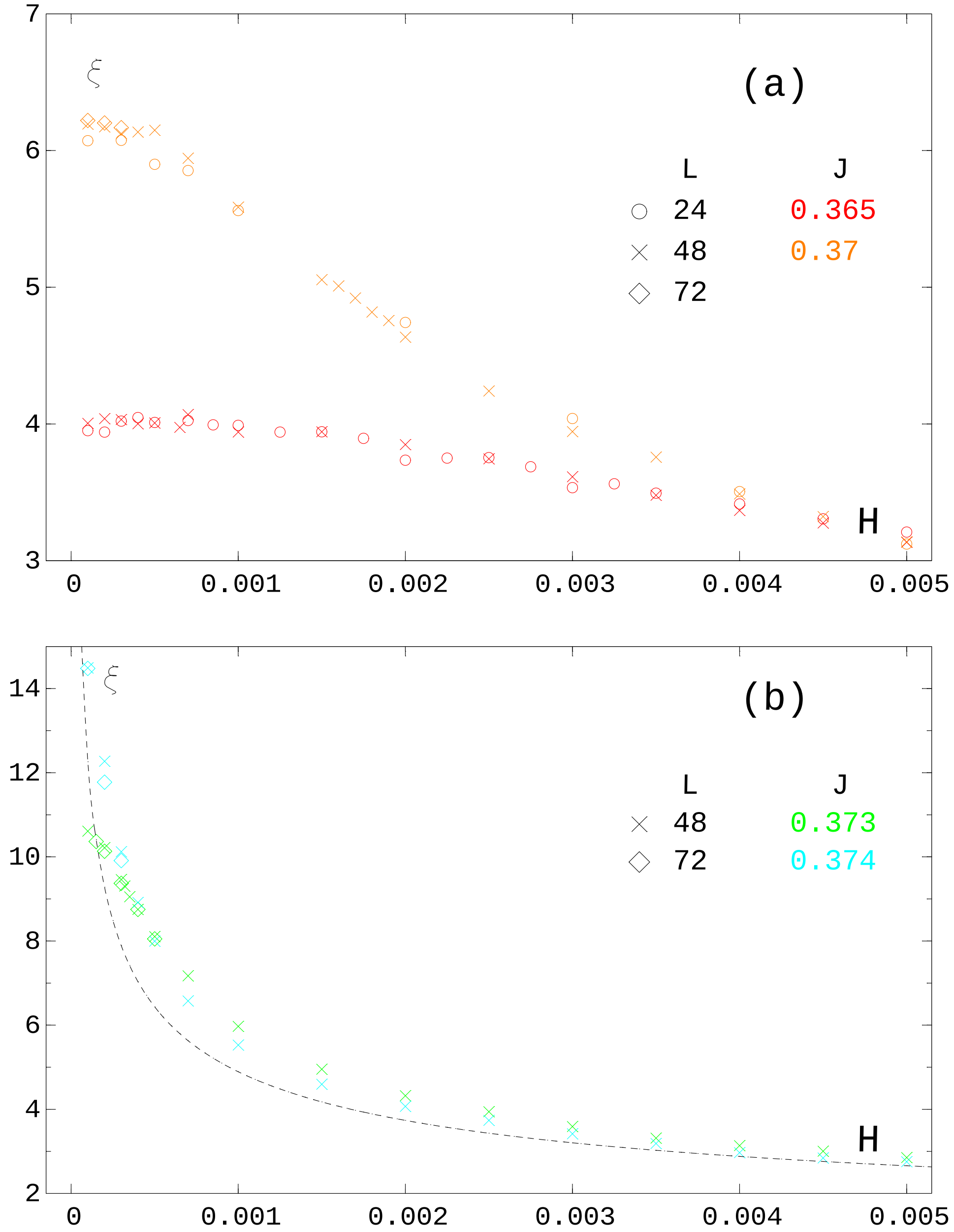

Abbildung 5.37: $\xi(H)$ in der heißen Phase bei den Kopplungen $J = 0.37$ und 0.365 (a) sowie bei $J = 0.374$ und 0.373 (b) für verschiedene Gitterlängen L. Die gestrichelte Kurve in Teil (b) deutet den Verlauf der Funktion $\xi = 0.325\, h^{-\nu_c}(1 + 8\, h)$ bei $J = J_c$ an.

Um einen Eindruck zu erhalten, in welchen J- und H-Bereichen die Meßwerte skalieren, ist die Zustandsgleichung $g_\xi(z)$ zunächst mit allen vorhandenen Daten der jeweils größten Gitter in Abbildung 5.38 dargestellt. Es läßt sich erkennen, daß im Gegensatz zur Magnetisierung die Punkte bei $J = 0.385$ im Bereich kleiner Felder sowie bei $J = 0.365$ im Rahmen der statistischen Schwankungen mit denen der anderen Kopplungen skalieren. In der kalten Phase ist auch bei den übrigen Kopplungen jeweils ein Abweichen nach oben für große H zu beobachten. Bei $J = 0.3745$ weicht der Meßpunkt mit $H = 0.0001$ ebenfalls ab, während diejenigen bei höherem Feld ein Skalenverhalten aufweisen. Solche Abweichungen deuten auf einen noch vorhandenen Finite-Size-Effekt hin. Generell läßt sich anmerken, daß die Bestimmung der Zustandsgleichung der Korrelationslänge bei der vorhandenen Statistik mit geringerer Genauigkeit durchgeführt werden kann als die der Magnetisierung, jedoch können die J- und H-Intervalle demgegenüber ausgedehnt werden. Abschließend stellt Abbildung 5.39 $g_\xi(z)$ mit den Daten gemäß Tabelle 5.9 dar, welche aufgrund der vorigen Analysen ein Skalenverhalten zeigen. Bei $z = 0$ ist anstelle der Meßwerte des größten Gitters, da diese in Abbildung 5.38 eine große Streuung aufweisen, die zuvor berechnete Amplitude $\xi^c = 0.326(1)$ eingezeichnet. Die Stelle des Maximums der Kurve kann nur ungenau abgeschätzt werden als $z_\xi^{max} = 1.8(5)$. Es ist insbesondere nicht möglich zu unterscheiden, ob $z_\xi^{max} = z_\chi^{max}$ gilt. Wie bei der Suszeptibilität sind auch hier weitere Simulationen mit besserer Statistik nötig, will man diese Frage klären.

J	H	$\#N$
0.385	0.0003 - 0.0015	6
0.38	0.0001 - 0.0020	9
0.378	0.0001 - 0.0030	11
0.376	0.0002 - 0.0015	7
0.3755	0.0001 - 0.0005	4
0.3752	0.0001 - 0.0003	2
0.375	0.00015 - 0.0005	3
0.3745	0.0002 - 0.0015	7
0.374	0.0003 - 0.0050	13
0.373	0.0001 - 0.0050	18
0.37	0.0001 - 0.0050	19
0.365	0.0003 - 0.0050	14

Tabelle 5.9: J- sowie H-Bereich der für die Zustandsgleichung g_ξ verwendeten Daten. $\#N$ gibt die Anzahl der Meßpunkte pro Kopplung wieder.

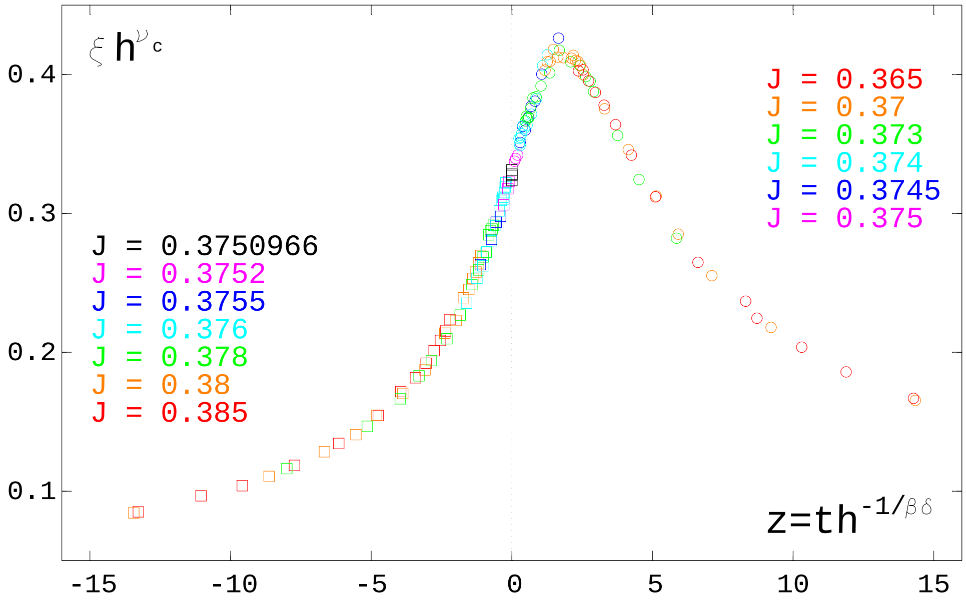

Abbildung 5.38: Zustandsgleichung $g_\xi(z)$ der Korrelationslänge mit allen Meßdaten der jeweils größten Gitter.

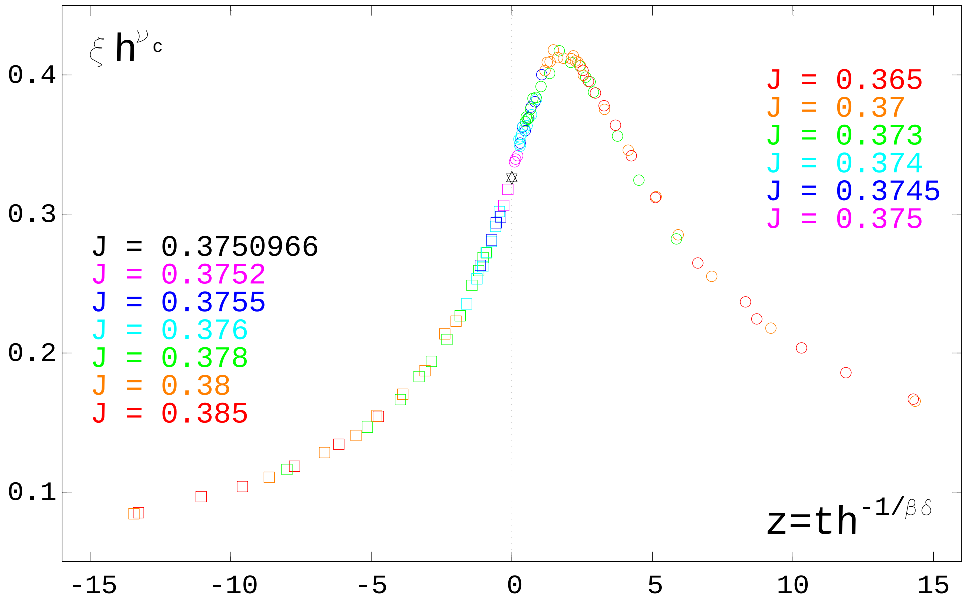

Abbildung 5.39: Überarbeitete Zustandsgleichung $g_\xi(z)$ der Korrelationslänge. Verwendet sind nur die Daten der jeweils größten Gitter gemäß Tabelle 5.9. Bei $z = 0$ ist die Amplitude $\xi^c = 0.326(1)$ eingezeichnet.

Zusammenfassung

In dieser Arbeit wurde das dreidimensionale Isingmodell mit verbesserter Wirkung auf einem kubischen Gitter mit periodischen Randbedingungen simuliert. Dabei wurde das System in Abhängigkeit von der Temperatur T und dem äußeren Feld H untersucht. Ziel der Analysen war die numerische Bestimmung der universellen Zustandsgleichung der Magnetisierung, deren Vergleich mit den theoretischen Vorhersagen und die Berechnung der ebenfalls universellen Zustandsgleichung der Korrelationslänge.

Hierzu mußten zunächst die Normierungen T_0 und H_0 in unserem Modell ermittelt werden. Für die Normierung der Temperaturskala betrachteten wir Simulationen auf der Koexistenzlinie ($T < T_c$, $H = 0$). Die Daten spiegelten nahe T_c gut das Verhalten der Magnetisierung $m \sim (T_c - T)^\beta$ wider, jedoch erwies sich bei größerem T-Intervall die Berücksichtigung von Korrekturen zum Scaling als notwendig. Uns gelang es, den Faktor T_0 mit einem relativen Fehler von 0.3 % zu bestimmen. Das Ergebnis ist in Übereinstimmung mit dem der Analyse der Amplitudenfunktion A_m^T. Aus Simulationen auf der kritischen Isotherme ($T = T_c$, $H > 0$) ließ sich die Normierung der Magnetfeldskala ermitteln. Dies gestaltete sich im Gegensatz zur vorigen T_0-Bestimmung als problematischer. Zwar konnte auch hier das Verhalten $m \sim H^{1/\delta}$ nahe $H = 0$ nachgewiesen werden, doch die Berücksichtigung der ebenfalls vorhandenen Korrekturen bei größeren Feldern erschwerten die Berechnung von H_0. Mit Hilfe der Amplitudenfunktion A_m^H konnte allerdings schließlich ein Resultat mit einem relativen Fehler von 0.7 % angegeben werden.
Für den benutzten J-H-Bereich sind die nicht-analytischen Korrekturen sehr gering, die analytischen jedoch deutlich größer und daher nicht zu vernachlässigen. Dieses Ergebnis zeigt, daß mit Verwendung der verbesserten Wirkung mit $\lambda_{opt} = 1.1$ die nicht-analytischen Korrekturterme annähernd auf null reduziert werden konnten, aber Korrekturen jedenfalls in dem von uns benutzten Kopplungsbereich trotzdem notwendig waren. Daher bleibt es fraglich, ob Simulationen des Standard-Isingmodells nicht zu ähnlich genauen Resultaten geführt hätten. Zwar sind hierbei auch die nicht-analytischen Korrekturen größer, jedoch ist der Rechenaufwand weitaus geringer, so daß in gleicher Zeit deutlich mehr Messungen hätten durchgeführt werden können.

Mit Hilfe der Normierungen T_0 und H_0 konnte im weiteren Verlauf die universelle Zustandsgleichung $f_G(z)$ der Magnetisierung numerisch bestimmt werden. Um einen Vergleich mit der feldtheoretischen Vorhersage durchzuführen, betrachteten wir die Zustandsgleichung auch in der Widom-Griffiths-Form $y(x)$, welche im Vergleich zu $f_G(z)$ eventuelle Abweichungen deutlicher hervortreten läßt. Es zeigte sich, daß unsere Daten mit der Vorhersage sowohl in der kalten als auch in der heißen Phase gut übereinstimmten. Im Rahmen unserer Meßgenauigkeit kann die feldtheoretisch bestimmte Parametrisierung daher vollständig bestätigt werden.
Diese läßt sich außerdem mittels der Skalenfunktion $f_\chi(z)$ der Suszeptibilität überprüfen, die im wesentlichen aus der Differentiation von $f_G(z)$ hervorgeht. Bei dem Vergleich der feldtheoretischen Kurve mit unseren Meßdaten blieb die Übereinstimmung für kleine Felder H in der kalten Phase bestehen, jedoch zeigte sich eine leichte Abweichung bei $T > T_c$. Ursache hierfür scheint im wesentlichen ein noch vorhandener Finite-Size-Effekt der Suszeptibilitäts-Daten zu sein, ein signifikanter Unterschied zur Vorhersage ließ sich daher nicht verifizieren.
Mit der Feststellung der Gleichheit der Skalenfunktion f_G des Isingmodells und der des verbesserten Isingmodells liegt außerdem eine numerische Bestätigung dafür vor, daß beide Modelle zur selben Universalitätsklasse gehören.

Neben der Bestimmung der Skalenfunktion der Magnetisierung bestand ein weiteres Ziel dieser Arbeit in der numerischen Berechnung der universellen Zustandsgleichung der Korrelationslänge. Im Gegensatz zu anderen Observablen, wie z. B. der Magnetisierung oder der Suszeptibilität, ist die Korrelationslänge eine schwierig zu ermittelnde Größe, wie anhand der Analysen und des Vergleichs der verschiedenen Verfahren deutlich wurde. Jedoch gelang uns mit der gewählten Berechnungsmethode eine hinreichend genaue Bestimmung der Korrelationslänge, so daß die Zustandsgleichung $g_\xi(z)$ ermittelt werden konnte. Im Rahmen unserer Meßgenauigkeit skalieren die ξ-Werte im Vergleich zu m und χ in einem größeren J- und H-Bereich. Um die statistischen Fehler zu reduzieren und auch hier das Maximum der Kurve besser einzugrenzen, sind aufwendigere Simulationen mit weitaus mehr Messungen nötig. Ebenso wäre es wünschenswert, eine feldtheoretische Bestätigung der gefundenen Funktion zu erhalten, welche bis jetzt aber noch nicht vorliegt.
Ein Vergleich der Resultate mit denen des dreidimensionalen O(4)-Spinmodells aus Ref. [1] macht den Einfluß des Goldstone-Effektes im O(4)-Modell deutlich, welcher beim Isingmodell nicht auftritt. Dies wird in Ref. [1] durchgeführt. Während die Korrelationslänge in unserem Fall nur bei $t = h = 0$ divergiert, ergibt sich beim O(4)-Modell auch eine Divergenz auf der Koexistenzlinie. Dies wird insbesondere bei der Zustandsgleichung g_ξ^T der transversalen Korrelationslänge ξ_T sichtbar, welche sich für $z \to -\infty$ wie $g_\xi^T \to \infty$ verhält. Die Skalenfunktion g_ξ^L der longitudinalen Korrelationslänge ξ_L fällt für $z \to -\infty$ wesentlich schwächer ab als die des Isingmodells. In der heißen Phase ergibt sich hingegen ein ähnlicher Verlauf.

Literaturverzeichnis

[1] L. Fromme, *Goldstone-Effekte und Korrelationslängen des dreidimensionalen O(4)-Spinmodells*, Diplomarbeit, Bielefeld (2002).

[2] A. L. Talapov und H. W. J. Blöte, *The Magnetization of the 3D Ising Model*, J. Phys. A**29** (1996) 5727.

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

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

[5] F. J. Wegner, *Corrections to Scaling Laws*, Phys. Rev. B**5** (1972) 4529.

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

[7] B. Widom, *Equation of State in the Neighborhood of the Critical Point*, J. Chem. Phys. **43** (1965) 3898.

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

[9] R. Guida, J. Zinn-Justin, *3D Ising Model: the Scaling Equation of State*, Nucl. Phys. B**489** (1997) 626.

[10] P. Schofield, *Parametric Representation of the Equation of State near a Critical Point*, Phys. Rev. Lett. **22** (1969) 606.

[11] P. Schofield, J. D. Litster, J. T. Ho, *Correlation between Critical Coefficients and Critical Exponents*, Phys. Rev. Lett. **23** (1969) 1098.

[12] B. D. Josephson, *Equation of State near the Critical Point*, J. Phys. C**2** (1969) 1113.

[13] M. Hasenbusch, *A Monte Carlo study of leading order scaling corrections of ϕ^4 theory on a three dimensional lattice*, J. Phys. A**32** (1999) 4851.

[14] R. H. Swendsen, J. Wang, *Nonuniversal critical dynamics in Monte Carlo simulations*, Phys. Rev. Lett. **58** (1987) 86.

[15] U. Wolff, *Collective Monte Carlo updating for spin systems*, Phys. Rev. Lett. **62** (1989) 361.

[16] R. C. Brower, P. Tamayo, *Embedded Dynamics for ϕ^4 Theory*, Phys. Rev. Lett. **62** (1989) 1087.

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

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

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

[20] M. Hasenbusch, K. Pinn, S. Vinti, *Critical Exponents of the 3D Ising Universality Class From Finite Size Scaling With Standard and Improved Actions*, hep-lat/9806012.

[21] H. G. Ballesteros, L. A. Fernández, V. Martín-Mayor, A. Muñoz Sudupe, *Finite Size Scaling and "perfect" actions: the three dimensional Ising model*, Phys. Lett. B**441** (1998) 330.

[22] J. Zinn-Justin, *Precise Determination of Critical Exponents and Equation of State by Field Theory Methods*, Phys. Rep. **344** (2001) 159.

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

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

Danksagung

Diese Arbeit wurde unter Anleitung von Herrn Prof. Dr. Jürgen Engels durchgeführt. Ich möchte Herrn Prof. Dr. Engels meinen besonderen Dank für seine hervorragende Unterstützung und Bereitschaft aussprechen, jederzeit für Fragen und Diskussionen zur Verfügung zu stehen.
Weiterhin gilt mein Dank meinem Kommilitonen Lars Fromme für die ausgezeichnete und produktive Zusammenarbeit während des gesamten Studiums. Außerdem möchte ich mich bei Thomas Schulze und Sven Holtmann für ihre Hilfe und Anregungen bedanken. Mein Dank geht auch an Christian Schmidt sowie die gesamte Arbeitsgruppe, die eine angenehme Arbeitsatmosphäre geschaffen hat.

Selbstverständlich gebührt mein Dank auch meinen Eltern, die mich in allen Belangen während der Studienzeit unterstützt haben.

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