Skalenverhalten am Endpunkt einer Phasenübergangslinie erster Ordnung

Diplomarbeit

Fakultät für Physik
Universität Bielefeld

vorgelegt von
Sven Stickan

19. Mai 2000

Inhaltsverzeichnis

Abbildungsverzeichnis

Einleitung

Phasenübergänge treten in der Physik in vielen verschiedenen Teilbereichen wie in der Elementarteilchenphysik, Kosmologie, Biophysik und der Festkörperphysik auf. Dabei spricht man von Phasenübergängen, wenn kleine Veränderungen in einem Parameter zu einer "qualitativen Veränderung" der Eigenschaften der untersuchten Materie hat.

Ein Phasenübergang in der alltäglichen Erfahrung ist der Übergang des Wassers von einer flüssigen Phase in eine gasförmige Phase. Dieser ist bei atmosphärischen Drücken ein Phasenübergang von sogenannter erster Ordnung und tritt bei der allgemein bekannten Temperatur von 100° Celsius auf. Erhitzt man jedoch das Wasser in einem Kessel, so wird bei der Übergangstemperatur der Unterschied der inneren Energie zwischen dem verdampfenden Wasser und dem Wasserdampf immer kleiner je höher die Dichte im Kessel ist. Bei einer Dichte von $0.323 \ \frac{g}{cm^3}$ und bei einer Temperatur von $T_c = 647K$ ist beim Phasenübergang der Unterschied in der Energie völlig verschwunden und es findet ein sogenannter Phasenübergang zweiter Ordnung statt. Dieser Phasenübergang kann im Rahmen der Statistischen Mechanik beschrieben werden. Jedoch treten sehr ähnliche Phänomene auch innerhalb der wesentlich komplizierteren Quanten-Feld-Theorien auf. Die Art der Beschreibung dieser Phänomene bleibt jedoch dieselbe. Dabei macht man es sich zunutze, daß die euklidische Pfadintergralformulierung einer Quanten-Feld-Theorie eine Analogie zur Beschreibung von thermodynamischen Erwartungswerten in der statistischen Mechanik aufweist. Dies macht man sich z. B. bei der Beschreibung der Phasenübergänge in der Elementarteilchenphysik zunutze, die bei hohen aber endlichen Dichten und/oder Temperaturen auftreten. Dort funktionieren die Methoden der Störungstheorie meistens nicht mehr. Sie können jedoch durch die Gitterregularisierung mit Monte-Carlo Simulationen untersucht werden.

Im frühen Universum tritt $10^{-11}s$ nach dem Urknall ein Phasenübergang auf, der durch die elektroschwache Wechselwirkung beschrieben wird. Dies ist im sogenannten Standard-Modell der Elementarteilchen ein Phasenübergang erster Ordnung, wenn die Masse des Higgs-Teilchens unterhalb einer kritischen Schwelle liegt. Hat dieses Teilchen jedoch eine zu große Masse, findet innerhalb dieses Modelles kein

Phasenübergang mehr statt. Dazwischen liegt eine kritische Higgs-Masse, bei dem dieser Phasenübergang wieder ein Übergang zweiter Ordnung ist. Um die im Universum beobachtete Baryonen-Asymmetry durch diesen Phasenübergang zu erklären, müssen die drei sogenannten Sahkarow Bedingungen erfüllt sein. Erstens muß es im frühen Universum einen Baryonenzahl verletzenden Prozeß geben haben, damit es diese Asymmetrie überhaupt geben kann. Zweitens muß die C und CP-Symmetrie verletzt sein, damit dieser Prozess eine eindeutige Richtung bekommt und drittens darf es bei diesem Prozess keinen Gleichgewichtszustand gegeben haben. Die letzte Bedingung ist dadurch begründet, daß der die Baryonenzahl verletzende Prozess nach dem elektroschwachen Phasenübergang im expandierenden frühen Universum nicht mehr stattfindet soll. Dafür muß nach [1] aber der Phasenübergang stark genug gewesen sein. Deswegen ist die Masse des Higgs-Teilchens von entscheidender Bedeutung für diesen Prozess. Nach den Untersuchungen in [2] muß die Masse unter 80 GeV/c^2 liegen. Diese Masse ist allerdings durch die Experimente nahezu ausgeschlossen[‡], so daß man eine andere Erklärung dieser Asymmetrie finden oder das Standard-Modell modifizieren muß. So erlaubt z. B. das Minimale Supersymmetrische Standard-Modell eine größere Higgs-Masse für einen Phasenübergang erster Ordnung.

Eine kompliziertere Struktur zeigt die QCD, die die starke Wechselwirkung beschreibt. Bei ihr ändert sich die Art des Phasenübergangs durch die Variation der Masse des Quarks. Aus diesen Quarks und ihren Antiteilchen sind sämtliche Teilchen zusammengesetzt, die durch die starke Wechselwirkung beeinflußt werden. Dabei haben die Quarks sechs verschiedene Flavours. Die drei leichtesten sind das Up-, Down- und Strange-Quark und die drei schwereren sind das Bottom- Charm- und Top-Quark. Die Massen der letzten drei sind aber wesentlich größer als die der ersten drei Quark-Flavour und auch als die Temperaturskala bei der die Phasenübergänge dieser Theorie stattfinden. Sie spielen daher für die Thermodynamik dieses Überganges keine Rolle. Geht man deswegen von der drei Flavour QCD aus, so hat diese Theorie für verschwindende Quark-Masse einen Phasenübergang erster Ordnung. Dieser Übergang wird auch Chiraler-Phasenübergang genannt, da das System eine sogenannte Chirale-Symmetrie oberhalb einer endlichen Temperatur aufweist. Beim Übergang zu tiefen Temperaturen wird diese Symmetrie dann spontan gebrochen. Die QCD hat aber auch für schwere Quarkmassen einen Phasenübergang erster Ordnung, den sogenannten Deconfinement-Übergang. Da die Quarks unter normalen Bedingungen nur als gebundende Teilchen auftreten nimmt man an, daß das Confinement eine Eigenschaft dieser Theorie ist. Dabei geht man davon aus, daß die Bindungsenergie der Quarks linear mit dem Abstand zwischen ihnen ansteigt. Für kurze Abstände zwischen den Quarks verhalten sich dann die Quarks wie freie Teilchen, so daß man dann auch von asymptotischer Freiheit spricht. Bei hohen Temperaturen hat diese Theorie dann einen Phasenübergang erster Ordnung von

[‡]Die gegenwärtige experimentelle untere Schranke für die Higgs-Masse nach dem Standard Modell ist $m_H \geq 109$ GeV/c^2 [3]

dieser Confinement-Phase in eine Deconfinement-Phase, dem Quark-Gluon Plasma. Bei mittleren Quarkmassen zeigt sich jedoch kein Phasenübergangs-Verhalten. D. h. es existieren zwei verschiedene Massen, bei denen sich die Art des Phasenüberganges ändert. Wiederum ist es wichtig, bei welcher Quark-Masse dieser Übergang auftritt, um zu erfahren ob bei physikalischen Quarkmassen diese Theorie einen Phasenübergang aufweist.

All dies sind Beispiele, in denen ein Phasenübergang erster Ordnung vorliegt, der durch einen weiteren Parameter in einen sogenannten kritischen Endpunkt für diesen Parameter übergeht. Dort haben diese Systeme dann einen Phasenübergang zweiter Ordnung. Dabei ist man natürlich auch daran interessiert, welche Eigenschaften die Systeme gerade an diesen besonders ausgezeichneten Punkten haben, denn für die Phasenübergänge zweiter Ordnung ist in den 60er Jahren des letzten Jahrhunderts eine allgemeine Beschreibung in der Renormierungsgruppen-Theorie gefunden worden. Diese beruht auf sehr allgemeinen Annahmen von den Skaleneigenschaften eines Systems und liefert Erklärungen für die qualitativen Eigenschaften sehr unterschiedlicher Systeme. Der Nachteil dieser Beschreibung ist jedoch der, daß es trotzdem nur in sehr wenigen Fällen gelungen ist, die Eigenschaften dieses Phasenüberganges analytisch zu berechnen. Eine andere Möglichkeit ist die Simulation dieser Phasenübergänge als Modelle auf dem Computer. Dieses Ziel wird auch in dieser Arbeit verfolgt. Dabei wird hier das dreidimensionale drei Zustands Potts-Modell mit äußerem Feld untersucht. Dieses äußere Feld ist hier der Parameter, der die Stärke des 1.Ordnungs Phasenüberganges bestimmt. Dieses Modell hat desweiteren eine direkte Verbindung zu dem Deconfinement Phasenübergang der QCD.

Der Aufbau dieser Arbeit ist nun folgender. Im ersten Kapitel wird zuerst das Potts-Modell und seine Observablen beschrieben. Danach wird kurz der Aufbau der QCD erläutert und dann mit Hilfe der euklidischen Pfadintegralformulierung die Gitterregularisierung nach Wilson durchgeführt. Anschließend wird die so erhaltene Beschreibung des Systems mit dem Potts-Modell in Beziehung gesetzt, um die Bedeutung des Phasenüberganges des Potts-Modells für den Deconfinement Phasenübergang der QCD zu erläutern. In Kapitel 2 schließt sich die allgemeine Theorie für die Phasenübergänge erster und zweiter Ordnung an. Dabei wird besonders auf die Unterschiede der beiden Phasenübergänge in endlichen Systemen eingegangen. Am Ende dieses Kapitels wird ein Verfahren zum Auffinden des kritischen Endpunktes erläutert, welches schon zum Bestimmen der kritischen Dichte im Modell für den Flüssig-Gas Übergang des Wassers (s.[4]) und für das Auffinden der kritischen Higgs-Masse in Modellen für die Theorie des elektroschwachen Phasenüberganges (s. [2]) angewendet wurde. Im 3. Kapitel werden die Simulationsmethoden und die Auswertung der durch die Simulation gewonnenen Daten besprochen. Im letzten Kapitel sind die numerischen Resultate aufgeführt. Diese werden in der Zusammenfassung nochmals diskutiert und bewertet. Im Anhang sind dann einige Daten zu den Simmulationen zusammengestellt.

Kapitel 1

Das Potts-Modell und die QCD

1.1 Das Potts-Modell mit äußerem Feld

Diskrete Spin Modelle, wie z. B. das Potts-Modell, sind oft benutzte Modelle für die Statistische Mechanik und deren Beschreibung von Phasenübergängen. Bei ihnen findet ein Phasenübergang statt, wenn die Symmetrie eines Systems bei Änderung eines äußeren Parameter spontan gebrochen wird. Beim hier untersuchten Potts-Modell ist dies eine Z(3)-Symmetrie, die bei tiefen Temperaturen spontan gebrochen ist. Deswegen spricht man dann auch von einem Temperatur getriebenen Phasenübergang. Eine Verallgemeinerung dieses Potts-Modells sind die q-Zustand Potts-Modelle die eine Z(q)-Symmetrie besitzen. Diese Modelle sind durch die Hamilton Funktion

$$\mathcal{H} = -J \sum_{<i,j>} \delta(\sigma_i, \sigma_j) - H \sum_{i=1}^{V} \delta(\sigma_i, \sigma_g) \tag{1.1}$$

auf einem isotropen d-dimensionalem Gitter der Größe $V = L^d$ gegeben(s.[5]). Die σ_k sind die verallgemeinerten Spins, die die Zustände 1,..,q annehmen können. Im hier betrachteten Fall ferromagnetischer Kopplungen ist die Kopplung der Spins $J > 0$, da benachbarte Spins in gleichen Zuständen die Energie minimieren sollen. Das äußere Feld $H > 0$ bricht die Z(q)-Symmetrie explizit, da es die Besetzung des Zustandes g bevorzugt. Weil desweiteren immer von kurzreichweitigen Wechselwirkungen ausgegangen wird, geht die erste Summe nur über alle Gitterplätze i und d nächste Nachbarn j mit periodischen Randbedingungen an den Grenzflächen des Gitters. Für $q \leq 3$ ist eine äquivalente Formulierung dieser Modelle durch das sogenannte Clock-Modell

$$\mathcal{H} = -J \sum_{<i,j>} Re(\vec{s_i}\vec{s_j}^*) - H \sum_{i=1}^{V} Re(\vec{s_i})$$

gegeben. Die Äquivalenz zu dem, von nun an immer betrachteten, 3-Zustands Potts-Modell ist durch

$$\vec{s_i} = \exp\left(\frac{2\pi i}{3}\sigma_i\right) \tag{1.2}$$

und durch die Relation

$$\delta(\sigma_i, \sigma_j) = \frac{2}{3}\,\mathrm{Re}(\vec{s_i}\vec{s_j}^{\,*}) + \frac{1}{3} \tag{1.3}$$

gegeben. Mit der Hamilton-Funktion ergibt sich dann die Zustandssumme und die freie Energiedichte zu

$$Z = \sum_{\{\sigma_i\}} e^{-\beta\mathcal{H}} \tag{1.4}$$

$$f = -\frac{1}{\beta V}\ln Z \tag{1.5}$$

mit $\beta = \frac{1}{kT}$ als inverse Temperatur und dem Boltzmann Faktor k. Daraus ergeben sich die thermodynamischen Größen durch Ableitungen. Eine ist die Magnetisierungsdichte m, die durch

$$\langle m \rangle = -\frac{\partial f}{\partial H} \tag{1.6}$$

mit

$$m = \frac{1}{V}\sum_{i=1}^{V}\delta(\sigma_i, \sigma_g) \tag{1.7}$$

gegeben ist. Eine weitere ist der Ordnungsparameter ϕ, welcher ein Indikator für die Phase sein soll, in der man sich befindet. Dabei wählt man ihn üblicherweise so, daß er in der symmetrischen Phase 0 und in der gebrochenen Phase $\neq 0$ ist. Ein möglicher Ordnungsparameter für H=0 ist

$$\phi = \left\langle \left| \frac{1}{V}\sum_{i=1}^{V}\vec{s_i} \right| \right\rangle . \tag{1.8}$$

Die Frage nach einem Ordnungsparameter für $H \neq 0$ wird später noch genauer untersucht. Die innere Energiedichte u ist in einem kanonischen System wie diesem durch

$$\begin{aligned} u &\equiv f - T\frac{\partial f}{\partial T} = -\frac{1}{V}\frac{\partial \ln Z}{\partial \beta} = \frac{\langle \mathcal{H} \rangle}{V} \\ &= \frac{1}{V}\left\langle -J\sum_{<i,j>}^{V}\delta(\sigma_i, \sigma_j) - H\sum_{i=1}^{V}\delta(\sigma_i, \sigma_g)\right\rangle \\ &\equiv \frac{1}{V}(-J\langle E \rangle - H\langle M \rangle) \end{aligned} \tag{1.9}$$

definiert. Dabei ist E der Anteil der Energie durch Link-Beiträge

$$E = \sum_{<i,j>}^{V}\delta(\sigma_i, \sigma_j). \tag{1.10}$$

Weitere wichtige Größen erhält man durch mehrfache Ableitungen der Zustandssumme. Die eine ist die Suszeptibilität

$$\chi = \frac{\partial m}{\partial H} = \beta V \left[\left\langle m^2 \right\rangle - \langle m \rangle^2 \right], \tag{1.11}$$

die auch durch das Fluktuations-Disspations Theorem gegeben ist. Eine andere Größe ist die spezifische Wärme c

$$c = \frac{\partial u}{\partial T} = \frac{1}{VkT^2} \left[\left\langle \mathcal{H}^2 \right\rangle - \langle \mathcal{H} \rangle^2 \right]. \tag{1.12}$$

1.2 Die QCD als Eichtheorie

Die QCD beschreibt ein System von Quarks, die durch die starke Kraft miteinander wechselwirken und ist als Yang-Mills Eichtheorie definiert. Die Wechselwirkungen treten bei diesen Theorien als bosonische Eichfelder auf. Die Objekte, die durch diese Felder beschrieben werden, heißen in der QCD Gluonen. Da sie durch die nicht abelsche SU(3)-Eichgruppe beschrieben werden, können sie auch untereinander wechselwirken. Dies führt dazu, daß es eine Phase gibt, in der die Gluonen in neutralen Farbzuständen gebunden sind. Dies ist die sogenannte Confinement Phase. Die heiße Phase, in der die Gluonen frei propagieren können wird dann als Deconfinement Phase bezeichnet. Das gleiche gilt auch für die Quarks, die in der Confinement Phase zu Hadronen gebunden sind und sich in der Deconfinement Phase wie freie Teilchen verhalten. Zur Beschreibung der vollen QCD fängt man bei der Lagrangedichte eines freien nicht wechselwirkenden fermionischen Teilchens an. Sie ist in Anlehnung an die Dirac-Gleichung durch die Lagrangedichte

$$\mathcal{L}_F(x) = \sum_{f,c} \bar{\psi}_c^f(x)(i\partial\!\!\!/ - m_f)\psi_c^f(x) \tag{1.13}$$

mit der Summe über die Fermionischen- und und Farbfreiheitsgrade der QCD und den Feldern $\psi(\bar{\psi})$ der (Anti-)Teilchen gegeben. Da die QCD eine Eichtheorie ist, soll diese invariant unter lokalen SU(3) Eichtransformationen sein. Dies wird die Lagrangefunktion in Gl.(1.13) erst durch die sogenannte minimale Substitution der Ableitungen

$$\partial_\mu \longrightarrow D_\mu \equiv \partial_\mu + igA_\mu(x), \tag{1.14}$$

die die gluonische Wechselwirkung mit der Kopplungskonstanten g erzeugt. Diese Eichfelder A_μ(x) lassen sich mit Hilfe der 8 Generatoren λ_l dieser Eichgruppe, den sogenannten Gell-Man Matrizen, durch

$$A_\mu(x) = \sum_l A_\mu^l(x) \frac{\lambda_l}{2} \tag{1.15}$$

darstellen. Die eingeführten Felder transformieren sich dann mit $G(x) \in SU(3)$

$$\begin{aligned}\psi(x) &\longrightarrow G(x)\psi(x)\\ \bar{\psi}(x) &\longrightarrow \bar{\psi}(x)G^{\dagger}(x)\\ A_{\mu}(x) &\longrightarrow G(x)A_{\mu}(x)G^{\dagger}(x) - \frac{i}{g}G(x)\partial_{\mu}(x)G^{\dagger}(x).\end{aligned} \tag{1.16}$$

Zusätzlich zu dieser Langrangedichte kommt noch ein Term für die Gluonen hinzu,

$$\mathcal{L}_G = -\frac{1}{4}\sum_a F^a_{\mu,\nu}F^{\mu,\nu}_a \tag{1.17}$$

der ebenfalls eichinvariant ist. Der Feldstärke-Tensor $F^a_{\mu,\nu}$ wird wieder durch die Eichfelder mit den Strukturfunktionen $f^a_{b,c}$ der SU(3)-Gruppe

$$F^a_{\mu,\nu}(x) = \partial_\mu A^a_\nu(x) - \partial_\nu A^a_\mu(x) - g f^a_{b,c} A^b_\mu(x) A^c_\nu(x) \tag{1.18}$$

ausgedrückt. Damit erhält man die Lagrangedichte

$$\mathcal{L}(x) = \sum_{f,c} \bar{\psi}^f_c(x)(i\gamma^\mu D_\mu - m_f)\psi^f_c(x) - \frac{1}{4}\sum_a F^a_{\mu,\nu}(x)F^{\mu,\nu}_a(x). \tag{1.19}$$

1.3 Die QCD als Gittereichtheorie

Die Quantisierung dieser Theorie kann mit dem Pfadintegralformalismus geschehen. Mit den Pfadintegralen kann man die Vakuumerwartungswerte der zeitgeordneten Produkte der fermionischen und gluonischen Felder berechnen. Durch diese sogenannten Greens-Funktionen wird die QCD vollständig beschrieben. Um ihnen eine sinnvolle mathematische Bedeutung zu geben, kann man sie auf einem Gitter formulieren und mit Hilfe der Monte-Carlo Integration berechnen. Dafür braucht man sie in ihrer euklidischen Form

$$\begin{gathered}< 0|T(\Psi_\alpha(x), ..., \bar{\Psi}_\beta(y), ..., A_\mu(z), ...)|0 >= \\ \frac{\int \mathcal{D}A\mathcal{D}\Psi\mathcal{D}\bar{\Psi}\Psi_\alpha(x)...\bar{\Psi}_\beta(y)...A_\mu(z), ... \exp(S_E[A,\Psi,\bar{\Psi}])}{\int \mathcal{D}A\mathcal{D}\Psi\mathcal{D}\bar{\Psi} \exp(S_E[A,\Psi,\bar{\Psi}])}\end{gathered} \tag{1.20}$$

mit der euklidischen Wirkung S_E

$$S_E = \int d^4x \mathcal{L}_E(x). \tag{1.21}$$

Diese Wirkung kann man auch als klassisches Boltzmann-Gewicht ansehen. Damit wird aus den Greensfunktionen das statistisches Mittel der Felder, wenn man die Zustandssumme dementsprechend durch

$$Z = \int \mathcal{D}A\mathcal{D}\Psi\mathcal{D}\bar{\Psi} \exp(S_E[A,\Psi,\bar{\Psi}]) \tag{1.22}$$

definiert. Aus der in (1.19) definierten Lagrangedichte wird in euklidischer Form

$$\mathcal{L}_E(x) = -\sum_{f,c} \bar{\psi}_c^f(x)(i\gamma_\mu^E D^\mu + m_f)\psi_c^f(x) - \frac{1}{4}\sum_a F^a_{\mu,\nu}(x)F_a^{\mu,\nu}(x) \tag{1.23}$$

mit den Dirac Matrizen, die in der euklidischen Metrik durch

$$\{\gamma_\mu^E, \gamma_\nu^E\} = 2\delta_{\mu,\nu} \tag{1.24}$$

bestimmt werden. Um diese Theorie nun zu regularisieren, führt man ein diskretes vierdimensionales Raum-Zeit Gitter ein. Dieses wird durch die 4-Tupel $n = (n_1, ..., n_4) = (\vec{n}, t)$ mit $n_i \in \mathcal{N}$ beschrieben. Dabei beschränkt man sich auf ein endliches asymetrisches Gitter mit $N = N_s^3 \times N_t$ Gitterpunkten, das einen Gitterabstand τ in zeitlicher und a in räumlicher Richtung hat. Wählt man dann (anti-)periodische Randbedingungen für die Eichfelder (fermionischen Felder) in Zeitrichtung, so wird eine Temperatur eingeführt, die durch zeitliche Ausdehnung des Gitters

$$T = \frac{1}{N_t\tau} \tag{1.25}$$

gegeben ist. Aus dem Integral in (1.22) wird dann eine Summe und die fermionischen Felder sind dann nur lokal auf den Gitterpunkten definiert. Damit die Wirkung aber immer noch lokal eichinvariant ist, betrachtet man die Eichfelder als Links zwischen den Gitterpunkten, d. h. als Variablen $U_{n,\mu} \in SU(3)$. Dabei bezeichnet n den Gitterpunkt und μ die Richtung des Links. Eine Diskretisierung für den gluonischen Anteil der Wirkung ist nach [6] durch

$$S_G = \frac{1}{3}\beta \sum_n \left[\frac{a}{\tau}\sum_{i=1}^{3} Re\,Tr(U_{n,4,i}) + \frac{\tau}{a}\sum_{i<j}^{3} Re\,Tr(U_{n,i,j})\right]. \tag{1.26}$$

gegeben. Die $U_{n,\mu,\nu}$ sind die Plaquette-Variablen

$$U_{n,\mu,\nu} = U_{n,\mu}U_{n+\mu,\nu}U^\dagger_{n+\nu,\mu}U^\dagger_{n,\nu}\ . \tag{1.27}$$

Der fermionische Anteil der Wirkung ist nicht so einfach zu diskretisieren. Die als Wilson-Wirkung bezeichnete Diskretisierung ist durch

$$\begin{aligned} S_F &= \sum_n \bar{\psi}_n\psi_n - \frac{\kappa\tau}{a}\sum_{n,i}\left[\bar{\psi}_{n+i}(1+\gamma_i)U^\dagger_{ni}\,\psi_n + \bar{\psi}_n\,U_{ni}(1-\gamma_i)\psi_{n+i}\right] && (1.28)\\ &\quad -\kappa\sum_n\left[\bar{\psi}_{n+4}(1+\gamma_4)U^\dagger_{n4}\psi_n + \bar{\psi}_n U_{n4}(1-\gamma_4)\psi_{n+4}\right] \\ &\equiv \sum_{n,m}\bar{\psi}_n M_{nm}\psi_m && (1.29)\end{aligned}$$

gegeben. In der freien Theorie ist der Hopping-Parameter κ mit der Masse m über

$$\cosh(m\tau) = \frac{4\kappa^2 + (1-6\kappa\tau/a)^2}{4\kappa(1-6\kappa\tau/a)} \tag{1.30}$$

verknüpft. Benutzt man die Form mit der Fermion-Matrix M, so kann man die Gauss Integration über die Grassmann-wertigen Fermionenfelder ausführen und erhält eine effektive Wirkung von

$$S_{eff} = S_G + Tr \ln M \tag{1.31}$$

Diese Theorie hat für unendliche Quarkmasse m einen wie oben beschrieben Phasenübergang erster Ordnung von einer Confinement zu einer Deconfinement Phase [7]. Der Ordnungsparameter für diesen Phasenübergang ist bis auf Selbstenergieterme die freie Energie eines isolierten freien statischen Quarks F_q. Er ist mit den Polyakov-Loop

$$L_{\vec{n}} = Tr \prod_{t=1}^{N_t} U_{(\vec{n},t),4} \tag{1.32}$$

verbunden, und berechnet sich durch*

$$\exp(-\hat{F}_q/T) =< \frac{1}{V} \sum_{\vec{n}} L_{\vec{n}} > . \tag{1.33}$$

In der Confinement-Phase wird die Quarkladung nicht wie in der Deconfinement-Phase abgeschirmt, und das Quark besitzt eine unendliche freie Energie. Deswegen verschwindet auch der Erwartungswert des über das Volumen gemittelten Polyakov-Loops. Die diesem Phasenübergang zugrundeliegende Symmetrie wird durch eine globale Z(3) Transformation einer festen Zeitschicht der Eichfelder beschrieben. Die Eichwirkung ist unter einer solchen Transformation invariant. Dies gilt jedoch nicht für den Polyakov-Loop. Ein zusätzlicher fermionischer Anteil in der Wirkung bricht jedoch diese Symmetrie explizit. Damit hat dieser Anteil die gleiche Wirkung wie das äußere Feld im Potts-Modell.

1.3.1 Verbindung zwischen der QCD Gittereichtherorie und dem Potts-Modell

Man macht nun die Annahme, daß man die Summation über die SU(3) Eichfelder durch eine Summation über die Z(3) Eichfelder ersetzen kann, und setzt zusätzlich $N_t = 1$. Dann erhält man für $\tau/a << 1$ den Hochtemperatur- und starken Kopplungs-Grenzfall der QCD. Für diesen kann man noch annehmen, daß $z_{\vec{n}} = U_{(\vec{n},0),4} \in Z(3)$ gilt. Damit wird aus der Plaquette im ersten Term der Eichwirkung (1.26)

$$U_{(\vec{n},0),4,i} = U_{(\vec{n},0),4} U_{(\vec{n},0),i} U^{\dagger}_{(\vec{n}+\hat{i},0),4} U^{\dagger}_{(\vec{n},0),i} = z_{\vec{n}} z^{*}_{\vec{n}+\hat{i}} \; . \tag{1.34}$$

*Um aus $\hat{F}_q$ die freie Energie eines statischen Quarks zu erhalten muß noch die Selbstenergiekorrektur, die im Limes $a \longrightarrow 0$ divergent ist, abgezogen werden.

Da der zweite Term in diesem Grenzfall mit τ/a unterdrückt ist, wird aus der gesammten Eichwirkung

$$S_G = \beta\frac{a}{\tau}\sum_{\vec{n},i} Re(z_{\vec{n}} z^*_{\vec{n}+\hat{i}}). \tag{1.35}$$

Dies ist bis auf einen Faktor das Potts-Modell ohne äußeres Feld. Das äußere Feld kommt durch die Fermionmatrix hinzu. Dafür schreibt man sie nach

$$M = I - \kappa\frac{\tau}{a}H_s - \kappa H_t \tag{1.36}$$

um. Der mittlere Term verschwindet wieder in dem hier betrachteten Grenzfall und man erhält dann [6]

$$Tr\ln M = Tr\ln(I - \kappa H_t) = h_0(\kappa) + h(\kappa)\sum_{\vec{n}} Re(z_{\vec{n}}) \tag{1.37}$$

mit den Feldern

$$\begin{aligned} h_0(\kappa) &= a(\kappa) + b(\kappa) \\ h(\kappa) &= 2a(\kappa) - b(\kappa) \end{aligned}$$

die durch die Funktionen

$$\begin{aligned} a(\kappa) &= 4\ln(1 + 2\kappa) \\ b(\kappa) &= 4\ln(1 + 2\kappa + 4\kappa^2) \end{aligned}$$

mit dem Hopping-Parameter κ verknüpft sind. Das Feld h_0 beschreibt keine Kopplung und trägt deswegen nur als konstanter Faktor zur Zustandssumme bei. Für die Berechnung von Erwartungswerten ist er damit irrelevant. Aus der Zustandssumme von (1.22) ist nun

$$Z = \sum_{\{z_{\vec{n}}\in Z(3)\}} \exp\left[\frac{\beta a}{\tau}\sum_{\vec{n},i} Re(z_{\vec{n}} z^*_{\vec{n}+i}) + h(\kappa)\sum_{\vec{n}} Re(z_{\vec{n}})\right] \tag{1.38}$$

geworden. Dies ist wieder die Zustandssumme des Potts-Modells mit äußerem Feld, wie es im vorherigen Kapitel beschrieben wurde.

Kapitel 2

Theorie der Phasenübergänge

2.1 Phasenübergänge erster Ordnung

Man teilt heutzutage die Phasenübergänge in zwei Klassen ein. Die eine Klasse ist die der Phasenübergänge erster Ordnung, in denen eine latente Wärme auftritt. Dies meint, daß die Ableitung der freien Energie nach der Temperatur bei einer kritischen Temperatur‡ T_c unstetig ist. Diese Unstetigkeit definiert die latente Wärme l (Abb. 2.1)

$$l \equiv T_c(s^+ - s^-) = u^+ - u^- \equiv \Delta u, \tag{2.1}$$

wobei s die Entropiedichte ist. Angenommen, das System sei bei kleinen Temperaturen in der ersten Phase. Führt man dem System nun Energie zu, so steigt die Temperatur stetig bis $T = T_c$ an. Danach muß man erst dem System Energie zuführen, die der latente Wärme entspricht, bevor die Temperatur weiter ansteigt. Bei dieser Temperatur koexistieren beide Phasen aufgrund der Oberflächenspannung, die beide voneinander trennt. Erst wenn sich dann das ganze System in der 2.Phase befindet, ist der Phasenübergang vollzogen und die Temperatur kann weiter steigen. Eine weitere charakteristische Größe für die Klassifizierung eines Phasenüberganges ist die Korrelationslänge. Sie ist ein Maß für die räumliche Korrelation des Ordnungsparameters und bleibt bei diesem Übergang immer endlich. Es hat sich nach mehreren numerischen Analysen herausgestellt (z. B. [8] [9]), daß der Phasenübergang des dreidimensionalen Z(3) symmetrischen Potts-Modell ohne Feld schwach erster Ordnung ist, d.h. nur eine geringe latente Wärme hat. Experimentell findet ein solcher Phasenübergang in manchen strukturellen Phasenübergängen in bestimmten Kristallen statt.

‡Da ein Phasenübergang erster Ordnung kein kritisches Verhalten im Sinne der Renormierungsgruppen-Theorie zeigt, wird bei einem solchen Phasenübergang die Temperatur

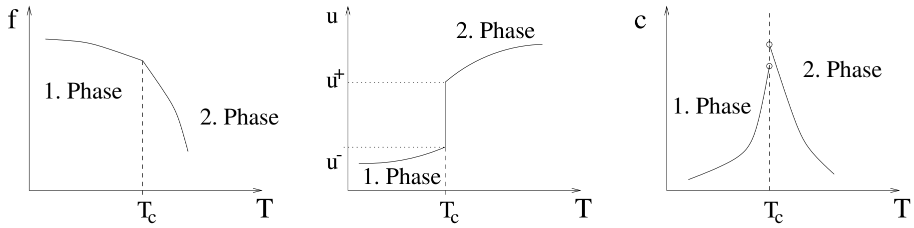


Abbildung 2.1: Phasenübergang 1.Ordnung

Die Vorstellung besagt nun, daß die latente Wärme des Potts-Modells mit zunehmenden äußerem Feld immer geringer wird, bis sie bei einer bestimmten Feldstärke H_c verschwindet. D. h. dort wird die erste Ableitung der freien Energie stetig. An diesem Punkt findet immer noch ein Phasenübergang statt, der aber nun in die Klasse der Phasenübergänge 2.Ordnung fällt. Diese nennt man auch wegen der stetigen Ableitung der freien Energie kontinuierliche Phasenübergänge. Diese werden ausführlich im nächsten Kapitel diskutiert.

T_c üblicherweise als Übergangs-Temperatur bezeichnet. Um einen einheitlichen Sprachgebrauch für beide Klassen von Phasenübergängen zu bekommen, wird in dieser Arbeit T_c einheitlich als kritische Temperatur bezeichnet.

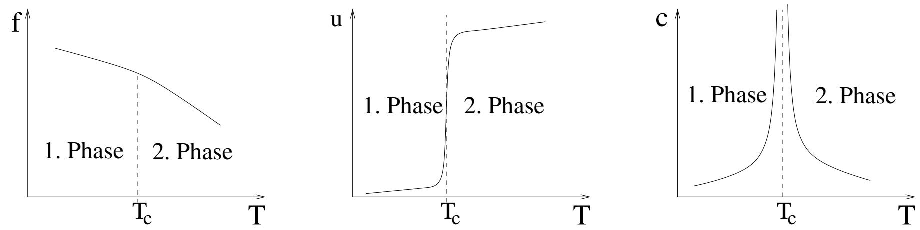


Abbildung 2.2: Phasenübergang 2.Ordnung

2.2 Phasenübergänge zweiter Ordnung

2.2.1 Kritische Exponenten und Universalitätsklassen

Man hat in der Natur beobachtet, daß viele stark unterschiedliche kontinuierliche Phasenübergänge gleiches kritisches Verhalten, wie zum Beispiel gleiche potenzartige Divergenz der spezifischen Wärme, zeigen. Deswegen hat man diese Art von Phasenübergänge in sogenannte Universalitätsklassen unterteilt. Dieses wird durch die kritischen Exponenten quantifiziert. Sie sind durch skalenunabhängige Potenzgesetze definiert, welche man man in den reduzierten Größen $t = \frac{T-T_c}{T_c}$ und $h = \frac{H-H_c}{kT_c}$ ausdrückt. Das erste bestimmt das Verschwinden des Ordnungsparameters mit der Temperatur

$$\lim_{H \to 0^+} \phi \propto (-t)^\beta \tag{2.2}$$

Die spontane Magnetisierung verschwindet bei $T = T_c$ mit

$$m \propto |h|^{1/\delta}. \tag{2.3}$$

Die spezifische Wärme c ohne äußeres Feld divergiert nach

$$c \propto |t|^{-\alpha}. \tag{2.4}$$

und die Suszeptibilität divergiert bei h=0 wie

$$\chi \propto |t|^{-\gamma}. \tag{2.5}$$

Die nach

$$G(r) \equiv <\phi(0)\phi(r)> - |<\phi>|^2 \tag{2.6}$$

definierte Korrelationsfunktion verhält sich für große r und bei kleinem t wie

$$G(r) \propto \frac{e^{\frac{-r}{\xi}}}{r^{d-2+\eta}} \tag{2.7}$$

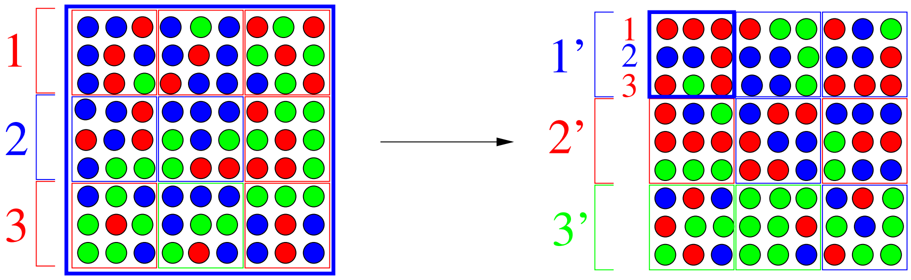


Abbildung 2.3: Blockspin-Transformation

mit η als der sogenannten anomale Dimension und der Korrelationslänge ξ, die ihrerseits für $t \to 0$ wie

$$\xi \propto |t|^{-\nu} \tag{2.8}$$

divergiert. Jedoch sind diese ganzen Exponenten nicht alle unabhängig, sondern durch bestimmte Skalenrelationen miteinander verknüpft. Die Begründung hierfür liefert die Renormierungsgruppentheorie.

2.2.2 Renormierungsgruppentheorie

Dazu betrachte ein Spinsystem mit kurzreichweitiger Kopplung, wie die nächste Nachbar Wechselwirkung, welches einen Phasenübergang 2. Ordnung aufweist. Die Ortsraumrenormierung wird dann durch sogenannte Blockspin-Transformationen beschrieben, wie sie z. B. in Abb. 2.3 dargestellt ist. Dazu wählt man ein beliebiges aber eindeutiges Verfahren, um aus einem gegebenen Gitter sogenannte Blockspins zu bilden. Dabei wird der Ortsraum um den Faktor b reskaliert. Ist nun $T > T_c$, so wird dadurch jede etwaige Ordnung zerstört und man erhält nach einer ausreichenden Zahl von Transformationen eine ungeordnete Konfiguration, die symmetrisch unter der Vertauschung der drei Farben (Spinzustände) ist. Bei $T < T_c$ wird sich bei diesem Vorgehen jedoch eine Farbe durchsetzen und man befindet sich in einer Phase in der diese Symmetrie gebrochen ist. Nur bei $T = T_c$ ist die Korrelationslänge unendlich. Dies bedeutet, daß eine solche Transformation das System nicht ändert und die Zustandssumme vor und nach der Transformation gleich bleiben sollte

$$\begin{aligned} Z' &= \sum_{\{\sigma_i'\}} e^{-\beta\mathcal{H}'(\{\sigma_i'\})} \\ &= \sum_{\{\sigma_i\}} e^{-\beta\mathcal{H}(\{\sigma_i\})} \\ &= Z \end{aligned} \tag{2.9}$$

Jedoch können bei dieser Transformation weitere Kopplungen hinzukommen, wodurch sich $\mathcal{H}$ und $\mathcal{H}'$ in der Form unterscheiden könnten. Diesem entgeht man,

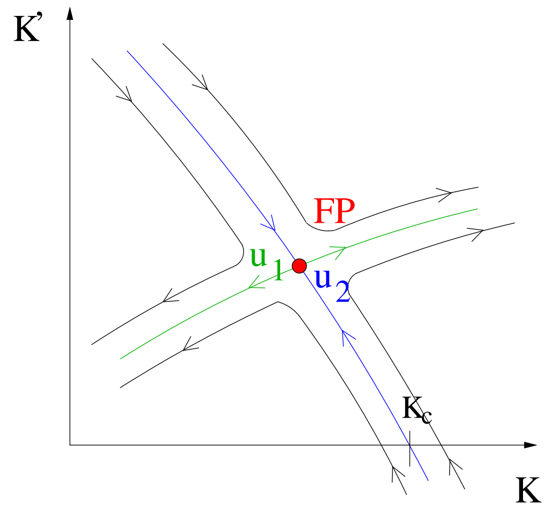


Abbildung 2.4: Renormierungsgruppen-Fluß

indem man $\mathcal{H}$ nicht nur als Funktion der Kopplungen mit dem nächsten Nachbarn betrachtet, sondern als Funktion von allen möglichen Kopplungen $\{K\}$. Dann bewirkt eine solche Transformation auch eine Bewegung des Systems im unendlich dimensionalen Kopplungsraum. Wird diese Transformation mit R bezeichnet, so kommt man auf die allgemeine Renormierungsgruppengleichung

$$\{K'\} = R(\{K\}). \tag{2.10}$$

Damit beschreiben die Blockspin-Transformationen also eine Trajektorie im Kopplungsraum. Bei diesen Trajektorien haben Fixpunkte $\{K^*\}$ unter solchen Transformationen eine besondere Bedeutung. Betrachtet man die Korrelationslänge des Systems bei einer bestimmten Kopplung $\{K\}$ so braucht man n($\{K\}$) Transformation, bis man zu einer anderen Kopplung K_0 mit einer endlichen Korrelationslänge ξ_0 kommt. Dabei wird die Änderung der Korrelationslänge durch

$$\xi(\{K\}) = \xi_o b^{n(\{K\})} \tag{2.11}$$

beschrieben. Je näher man an einem Fixpunkt startet, desto weniger ändert sich die Kopplung $\{K\}$, d. h. desto größer wird n($\{K\}$). Die Korrelationslänge divergiert dann für $\{K\} \to \{K^*\}$. Daraus folgt, daß das System bei der Kopplung $\{K^*\}$ kritisches Verhalten zeigt. Dieses Verhalten wird dann von dem Verhalten an diesem Fixpunkt bestimmt, d. h. man entwickelt den Einfluß der Transformationen in der Nähe dieses Fixpunktes. Das ist erlaubt, wenn die Transformation R beliebig oft differenzierbar ist. Dann kann man sie durch

$$\begin{aligned} K'_\alpha - K^*_\alpha &\propto \sum_\beta \left.\frac{\partial K'_\alpha}{\partial K_\beta}\right|_{\{K\}=\{K^*\}} \left(K_\beta - K^*_\beta\right) \\ &\equiv \sum_\beta T_{\alpha\beta} \left(K_\beta - K^*_\beta\right) \end{aligned} \tag{2.12}$$

annähern, d. h. durch die Matrix $T_{\alpha\beta}$ beschreiben. Die linken Eigenvektoren e^i mit den Eigenwerten λ^i dieser Matrix

$$\sum_\alpha e^i_\alpha T_{\alpha\beta} = \lambda^i e^i_\beta \tag{2.13}$$

definieren dann die Skalenvariablen u_i durch

$$u_i = \sum_\alpha e^i_\alpha \left(K_\alpha - K^*_\alpha\right). \tag{2.14}$$

Diese transformieren sich dann nach $u_i' = R(u_i) = \lambda^i u_i$. Die Eigenwerte werden üblicherweise mit dem Reskalierungsfaktor b und den sogenannten Renormierungsgruppen-Eigenwerte y_i in Beziehung gesetzt

$$\lambda_i \equiv b^{y_i}. \tag{2.15}$$

Mit ihnen unterschiedet man bei den Skalenvariablen drei Fälle

- $y_i > 0$: relevante Skalenvariablen, die vom Fixpunkt wegführen
- $y_i < 0$: irrelevante Skalenvariablen, die zum Fixpunkt hinführen
- $y_i = 0$: marginale Skalenvariable

Die kritischen Exponenten ergeben sich dann wieder aus den Ableitungen der freien Energie. Für die Abhängigkeit der freien Energiedichte von den Kopplungen macht man mit Hilfe von (2.9) den Ansatz:

$$f(\{K\}) = g(\{K\}) + b^{-d} f_s(\{K'\}). \tag{2.16}$$

Weiterhin geht man davon aus, daß das Verhalten nur von dem singulären Anteil der freien Energiedichte f_s und nicht vom regulären Anteil g beeinflußt wird. Schreibt man dann die Kopplungen mit Hilfe der Skalenvariablen um, so transfromiert sich dieser Teil nach

$$f_s(\{u_i\}) = b^{-d} f_s(\{b^{y_i} u_i\}). \tag{2.17}$$

Dabei vernachlässigt man die irrelevanten Skalenvariablen und entwickelt nach den relevanten Skalenvariablen um den Fixpunkt $\{u_i\} = \{0\}$. Diese seien die Temperatur t und das äußere Feld h, d. h.

$$u_t \propto t \tag{2.18}$$
$$u_h \propto h. \tag{2.19}$$

Bisher war b ein nicht weiter spezifizierter Faktor. Wählt man für ihn

$$b = |t|^{-\frac{1}{y_t}}, \tag{2.20}$$

so wird aus (2.17)

$$\begin{aligned} f_s(t,h) &= |t|^{\frac{d}{y_t}} f_s(\pm 1, |t|^{\frac{-y_h}{y_t}} h) \\ &\equiv |t|^{\frac{d}{y_t}} \Phi_\pm(|t|^{\frac{-y_h}{y_t}} h). \end{aligned} \tag{2.21}$$

Das Potenzgesetz mit der spontanen Magnetisierung liefert dann

$$m = \left.\frac{\partial f}{\partial h}\right|_{h=0} = |t|^{\frac{d-y_h}{y_t}} \Phi'_\pm(0). \tag{2.22}$$

Ein Vergleich mit (2.2) zeigt, daß $\beta = \frac{d-y_h}{y_t}$ gilt. Die zweite Ableitung

$$\chi = \left.\frac{\partial^2 f}{\partial h^2}\right|_{h=0} = |t|^{\frac{d-2y_h}{y_t}} \Phi''_\pm(0) \tag{2.23}$$

ergibt $\gamma = \frac{2y_h-d}{y_t}$. Die spontane Magnetisierung für h≠0 ist

$$m = \frac{\partial f}{\partial h} = |t|^{\frac{d-y_h}{y_t}} \Phi'_\pm(|t|^{-\frac{y_h}{y_t}} h). \tag{2.24}$$

Diese soll im Limes $t \to 0$ endlich bleiben, so daß

$$\Phi'_\pm(|t|^{-\frac{y_h}{y_t}} h) \propto \left(|t|^{-\frac{y_h}{y_t}} h\right)^{\frac{d}{y_h}-1} \tag{2.25}$$

gelten muß. Für den Grenzübergang folgt dann $\delta = \frac{y_h}{d-y_h}$. Für die spezifische Wärme erhält man

$$c = \left.\frac{\partial^2 f}{\partial t^2}\right|_{h=0} = \frac{d}{y_t}\left(\frac{d}{y_t} - 1\right) |t|^{\frac{d}{y_t}-2} \Phi_\pm(0) \tag{2.26}$$

welches im Vergleich mit (2.4) bedeutet, daß $\alpha = 2 - \frac{d}{y_t}$ ist. Verwendet man eine ähnliche Diskussion für die Korrelationsfunktion, so erhält man in der Nähe des Fixpunktes und für große Abstände (s.[10])

$$G(r,h,t) = \frac{G(b^{-1}r, b^{y_h}h, b^{y_t}t)}{b^{d-2+\eta}}. \tag{2.27}$$

Mit der obigen Ersetzung für b erhält man

$$G(r,h,t) \equiv \frac{g(rt^{1/y_t}, ht^{-y_h/y_t})}{r^{d-2+\eta}}. \tag{2.28}$$

Wieder führt ein Vergleich mit (2.7) auf $\nu = 1/y_t$ Daraus erkennt man, daß es nur zwei verschiedene kritische Exponenten geben kann. Die daraus resultierende Verknüpfung der kritischen Exponenten wird üblicherweise durch die Skalenrelationen

$$\alpha + 2\beta + \gamma = 2 \tag{2.29}$$

$$\alpha + \beta(1+\delta) = 2 \tag{2.30}$$

$$2 - d\nu = \alpha \tag{2.31}$$

$$\nu(2-\eta) = \gamma \tag{2.32}$$

angegeben. Den Wert dieser kritischen Exponenten kann man jedoch nur in Ausnahmefällen analytisch berechnen. Deswegen wird hier versucht, sie durch das Simulieren des Systems zu bestimmen. Dafür muß man sich aber notwendiger Weise auf endliche Systeme beschränken. In endlichen Systemen kann aber z.B. die Korrelationslänge nicht divergieren, so daß das System kein echtes kritisches Verhalten zeigen kann. Wie man dennoch Rückschlüße auf den thermodynamischen Limes ziehen kann, wird in dem nächsten Abschnitt diskutiert.

2.3 Effekte endlichen Volumens

2.3.1 Phasenübergang 1. Ordnung in einem endlichen Volumen

Hat das System nur ein endliches Volumen, so besteht immer die Möglichkeit, daß das System in der Nähe der kritischen Temperatur T_c von einer Phase in die andere springt. Die Rate mit der dies geschieht wird jedoch immer kleiner, je größer das System wird. Hinzu kommt, daß das System sich bei größeren Volumina immer näher an der kritischen Temperatur befinden muß, um noch flippen zu können. Im thermodynamischen Limes bleibt daß System dann für $T \neq T_c$ wie beschrieben, stabil in einer der beiden Phasen. Trägt man deswegen für endliche Systeme die innere Energie u in ein Histogramm ein, so bekommt dieses durch das Flippen einen Doppelpeak, dessen Peakabstand der latenten Wärme des Systems entspricht.

Ein weiterer wichtiger Punkt für die Rate, mit der das System zwischen den beiden Phasen flippt, ist die Oberflächenspannung. Sie sorgt für die stabile Koexistenz der beiden Phasen bei T_c. Die Methode zur Messung der Oberflächenspannung durch die Simulation des Systems in endlichen Systemen wurde zuerst von Binder in [11] vorgestellt. Trägt man die Häufigkeit, mit der ein System einen bestimmten Wert des Ordnungsparameters hat, in ein Histogramm auf, so geht man davon aus, daß man an diesem erkennen kann wie oft sich das System in einer der jeweiligen Phasen befindet. Für ein solches Histogramm einer reinen Phase nimmt man an, daß die Verteilung des Ordnungsparameters bei endlichem Volumen eine Gauß-Verteilung ist, die mit anwachsendem Volumen immer schärfer wird. Wenn der Ordnungsparameter ϕ in der i-ten Phase einen Erwartungswert $< \phi >_i \equiv \phi_i$ besitzt ist die Verteilung durch

$$P_i(\phi) = p_i \exp(- (\phi - \phi_i)^2) \tag{2.33}$$

gegeben. Dabei ist p_i die Wahrscheinlichkeit mit der sich das System in der i-ten Phase befindet. Sie wird durch die Boltzmann-Verteilung

$$p_i = \exp(-f_i V/T) \tag{2.34}$$

bestimmt[‡]. Die Wahrscheinlichkeit für die gemischte Phase ergibt sich dementsprechend aus der Boltzmann-Verteilung mit einer Energie, die anteilig aus der freien Energie der jeweiligen Phasen und der Oberflächenspannung zusammengesetzt ist

[‡]Im folgenden wird die Boltzmann Konstante k nicht mehr explizit angegeben, d.h. es wird k=1 gesetzt.

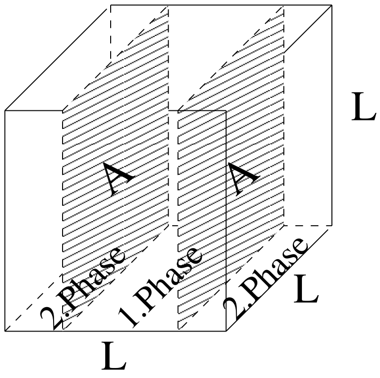


Abbildung 2.5: Koexistenz der beiden Phasen

$$P_m(\phi) \propto \exp(-\left[f_1 V_1 + f_2 V_2 + \sigma A\right]/T). \tag{2.35}$$

V_i : Volumenanteil mit der i-ten Phase mit $V_1 + V_2 = V$

σ : Oberflächenspannung zwischen den beiden Phasen

A : Grenzfläche zwischen den beiden Phasen

Die Abhängigkeit von ϕ ist hierbei nur implizit gegeben, da man ϕ als Maß für den relativen Anteil der beiden Phasen betrachten kann, wenn der Mittelwert durch

$$\phi = \gamma_1\phi_1 + \gamma_2\phi_2 \qquad \gamma_i \equiv \frac{V_i}{V} \tag{2.36}$$

gegeben ist. Dies ist plausibel, wenn man sich die Verteilung von ϕ in den jeweiligen Phasen als scharfe Peaks um ϕ_i denkt, und ϕ dann als gewichtetes Mittel zwischen diesen beiden Phasen ansehen kann. Desweiteren geht man davon aus, daß der Wert in der Mitte der beiden Peaks durch den Anteil der gemischten Phase bestimmt wird, da diese nur mit der Fläche statt mit dem Volumen zur Mitte hin abfällt. Deswegen nimmt man $P_m(\phi)$ als den Wert des Minimums $P_{min}(\phi)$ zwischen den beiden Peaks an. Aus den gleichen Gründen sind die Maxima der Verteilung durch die Punkte $P_{i,max}(\phi)$ bestimmt. Die kritische Temperatur ist dann durch die Relation $f_1 = f_2$ $(T = T_c)$ bestimmt. Betrachtet man nun die folgende Größe unter dieser Bedingung

$$\begin{aligned} \frac{P_{min}(\phi)}{P^{\gamma_1}_{1,max}(\phi)P^{\gamma_2}_{2,max}(\phi)} &\propto \frac{\exp(-\left[f_1V_1 + f_2V_2 + \sigma A\right]/T_c)}{\exp(-f_1V/T_c)^{\gamma_1}\exp(-f_2V/T_c)^{\gamma_2}} \\ &\propto \exp(-\sigma A/T_c), \end{aligned}$$

so erhält man die Oberflächenspannung in Abhängigkeit des Volumens und der Grenzfläche durch den Ausdruck

$$\ln\frac{P_{min}(\phi)}{P_{max}(\phi)} = const. - \frac{\sigma}{T_c}A \tag{2.37}$$

wenn $P_{1,max} = P_{2,max}$ ist. Bei periodischen Randbedingungen und der Annahme, daß beide Phasen das gleiche Volumen innerhalb des Systems einnehmen, wird die Energie der Grenzfläche durch einen wie in Abb. 2.5 angegebenen Verlauf minimiert. Daraus ergibt sich

$$-\frac{1}{2}\ln\frac{P_{min}(\phi)}{P_{max}(\phi)} \quad = const. + \frac{\sigma}{T_c}L^2. \tag{2.38}$$

Wenn man $-\frac{1}{2}\ln\frac{P_{min}(\phi)}{P_{max}(\phi)}$ gegen L^2 aufträgt, erhält man dann die Werte für die Konstante und $\frac{\sigma}{T_c}$ aus einem Geradenfit.

In einem endlichen System können keine echten Unstetigkeiten in der Energie, d. h. latente Wärme, auftreten. Dies hat natürlich auch Einfluß auf das thermodynamische Verhalten, wie z. B. die Verschiebung der kritischen Temperatur von T_c auf T_L. Um diesen Einfluß zu quantifizieren, wurden verschiedene phänomenologische und auf die Renormierungsgruppe beziehende Ansätze gemacht (s.[12] [13]). Diese ergaben folgende Relationen

$$C(T_L, L) \propto L^d \tag{2.39}$$

$$\chi(T_L, L) \propto L^d \tag{2.40}$$

$$\xi(T_L, L) \propto L^{-d} \tag{2.41}$$

$$|T_L - T_c| \propto L^{-d} \tag{2.42}$$

2.3.2 Phasenübergang 2. Ordnung in einem endlichen Volumen Finite Size Scaling

Das Finite Size Scaling wird wieder im Rahmen der Ortsraumrenormierung besprochen. Dazu betrachte ein Gitter mit $V = L^d$ Gitterplätzen. Die Größe L hat dann die Dimension einer Länge und geht in die physikalischen Größen durch die dimensionslose Größe $\hat{L} = \frac{L}{a}$ ein. Dabei ist a der physikalische Gitterabstand. Bei den Renormierungsgruppentransformationen (2.10) reskaliert man dann $a \to ba'$ und hält dabei L fest. Damit wird aus der Renormierungsgruppengleichung mit den Skalenvariablen

$$R(\{\{u_i\}, \hat{L}^{-1}\}) = \{\{u_i'\}, \hat{L}'^{-1}\} = \{\{b^{y_i}u_i\}, b\hat{L}'^{-1}\}, \tag{2.43}$$

d.h. man betrachet $\hat{L}^{-1}$ als weitere relevante Skalenvariable. Der Fixpunkt bleibt dabei im Ursprung bei $\{\{0\}, 0\}$, d. h. im thermodynamischen Limes. Die wichtigen Finite Size Scaling Relationen erhält man dann von der von (2.17) abgeleiteten Gleichung

$$f_s(t, h, \hat{L}^{-1}) = b^{-d} f_s(b^{y_t}t, b^{y_h}h, b\hat{L}^{-1}) \tag{2.44}$$

Setzt man noch $b = \hat{L}$, so erhält man für die Suszeptibilität

$$\chi(t, \hat{L}^{-1})\Big|_{h=0} = \hat{L}^{-d+2y_t} f_s''(\hat{L}^{y_t} t, 0, 1) \tag{2.45}$$

Angenommen diese Funktion erreicht ihr volumenabhängiges Maximum bei $z \equiv \hat{L}^{y_t} t_L$, dann erhält man mit Hilfe von

$$t_L = \left|\frac{T_L - T_c}{T_c}\right| = z\hat{L}^{-y_t} \tag{2.46}$$

und (2.23) die Gleichungen

$$|T_L - T_c| \propto \hat{L}^{-\frac{1}{\nu}} \tag{2.47}$$

$$\chi(t_L, \hat{L}^{-1}) \propto \hat{L}^{\frac{\gamma}{\nu}}. \tag{2.48}$$

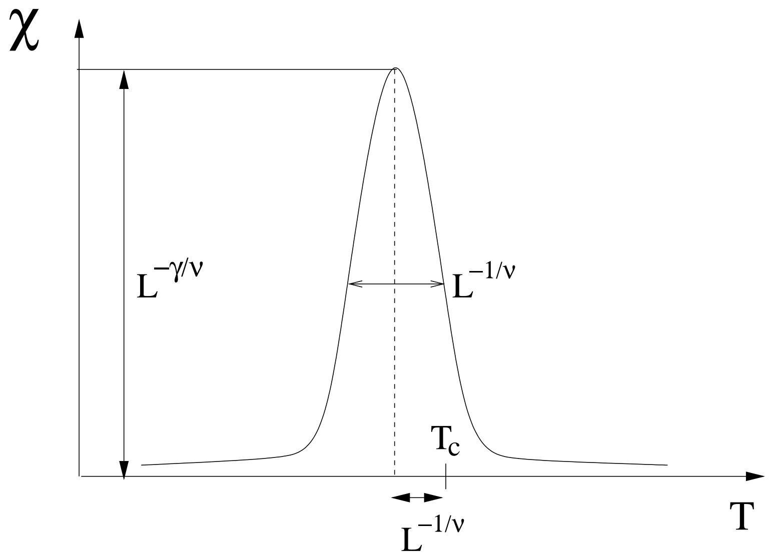


Abbildung 2.6: Finite Size Effekte der Suszeptibilität

Leitet man die freie Energie in Gl. (2.44) nach dem Feld h ab, so ergibt sich für $t = 0$

$$\begin{aligned} m &= \left.\frac{\partial f_s(t, h, \hat{L}^{-1})}{\partial h}\right|_{h=0,t=0} \\ &\propto \hat{L}^{-\beta/\nu} \end{aligned} \tag{2.49}$$

eine Finite Size Skalenrelation für die Magnetisierung m.

Weitere wichtige Größen sind die Renormierungsgruppeninvarianten, die zuerst in [14] vorgeschlagen wurden und die höhere Ableitungen der freien Energie beinhalten. Betrachtet man solch allgemeine höhere Ableitungen von (2.44)

$$\begin{aligned} m_k &= \left. \frac{\partial^k f_s(t,h,\hat{L}^{-1})}{\partial h^k} \right|_{h=0} \\ &\equiv \hat{L}^{-d+ky_h} \Phi^{(k)}(\hat{L}^{y_t} t), \end{aligned} \tag{2.50}$$

dann wird

$$\begin{aligned} B_k(\hat{L}^{y_t} t) &\equiv \hat{L}^{-d} \frac{m_{2k}}{(m_k)^2} \\ &= \frac{\Phi^{(2k)}(\hat{L}^{y_t} t)}{(\Phi^{(k)}(\hat{L}^{y_t} t))^2} \end{aligned} \tag{2.51}$$

nur am kritischen Punkt des thermodynamischen Limes unabhängig von der Gittergröße. Sie kann also benutzt werden, um die kritische Temperatur zu bestimmen. Die Größe B_2 kann man mit Hilfe von (1.7) wie folgt ausdrücken

$$B_2 = \frac{< m^4 >}{(< m^2 >)^2} - 3 \tag{2.52}$$

2.3.3 Crossover

Wenn man im sogenannten Crossoverbereich ist, kann die Suszeptibilität immer noch ein Extremum besitzen. Jedoch steigt die Peakhöhe ab einem ausreichend großem Volumen nicht mehr. Deswegen divergiert sie auch nicht mehr im thermodynamischen Limes und man erhält dann keinen Phasenübergang mehr. Man kann dies für die Berechnung des kritischen Exponenten δ ausnutzen, wenn man das Volumen des Systems so groß wählt, daß man keine Finite Size Effekte in der Suszeptibilität mehr hat. Dann kann man diesen Exponenten mit den Peakhöhen der Suszeptibilität mit Hilfe von Gl. (2.3) über

$$\chi \propto |h|^{\frac{1}{\delta}-1} \tag{2.53}$$

bei $T = T_c$ bestimmen. Leider ist es mit den gegebenen Möglichkeiten an Rechenzeit nicht möglich gewesen, dafür ausreichend große Gitter zu simulieren.

2.4 Bestimmung der Universalitätsklasse

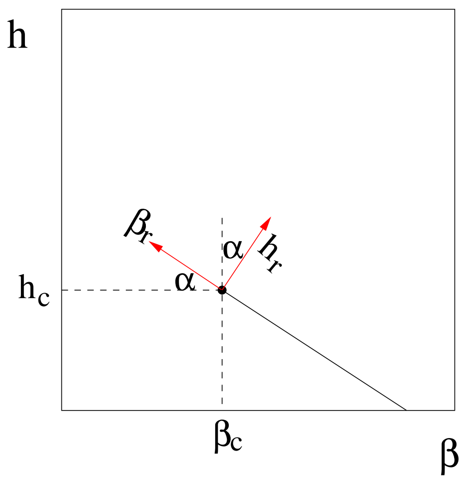


Abbildung 2.7: Bestimmung des Endpunktes

Für die Bestimmung der Universalitätsklasse ist es im Prinzip ausreichend, die kritischen Exponenten, die man am Endpunkt erhält, mit denen einer anderen Universalitätsklasse zu vergleichen. In dem hier betrachteten System liegt dieser Punkt am Ende einer Phasenübergangslinie erster Ordnung. Diesen muß man also zuerst ausreichend genau bestimmen. Dafür geht man entlang der Linie des Phasenüberganges erster Ordnung und benutzt dabei die in Kapitel 2.3 aufgeführten Kriterien, um zu entscheiden, wann genau der Phasenübergang nicht mehr erster sondern zweiter Ordnung ist, und wann das Crossover-Verhalten einsetzt. Wenn man jedoch diese Vorgehensweise wählt, so hat man das Problem, daß man zunächst keinen offensichtlichen Ordnungsparameter mehr hat, mit dessen Hilfe viele der o.a. Überlegungen verknüpft sind. Ein neuer Ordnungsparameter wird erst wieder durch die Symmetrie des Systems am Endpunkt bestimmt. Diese kann aber nicht mehr die ursprüngliche sein, da sie durch das magnetische Feld explizit gebrochen wird.

Man kann aber davon ausgehen, daß der kritische Endpunkt wieder zwei relevante Skalenvariablen besitzt, die mit einer temperaturartigen und einer magnetfeldartigen Richtung verbunden sind. Diese müssen a priori nicht orthogonal zueinander sein. Es wird sich jedoch herausstellen, daß sie dies im hier betrachteten Fall sind. Die Ableitung der freien Energie in diesen Richtungen definieren dann in der Nähe der kritischen Kopplungen die neuen energie- und magnetisierungsartigen Observablen e_r und m_r. Damit die neuen Skalenvariablen unabhängig sind, muß die Korrelationsmatrix der neuen Skalenoperatoren verschwinden. Da sie in erster Näherung Linearkombinationen der ursprünglichen Operatoren sind, kann man sie mit den Eigenvektoren der Korrelationsmatrix F aus den Termen Energie pro Link e und der

Magnetisierung m der Hamiltonfunktion identifizieren:

$$F = \begin{bmatrix} <(\Delta m)^2> & <(\Delta m)(\Delta e)> \\ <(\Delta e)(\Delta m)> & <(\Delta e)^2> \end{bmatrix}. \tag{2.54}$$

Dies entspricht einem Basiswechsel, der im zweidimensionalen Fall eine Drehung um einen Winkel α ist und durch die Transformation

$$M^T \begin{bmatrix} m \\ e \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \cos(\alpha) & \sin(\alpha) \\ -\sin(\alpha) & \cos(\alpha) \end{bmatrix} \begin{bmatrix} m \\ e \end{bmatrix} \equiv \begin{bmatrix} m_r \\ e_r \end{bmatrix} \tag{2.55}$$

beschrieben wird. Normiert man diese neuen Observablen so, daß der Mittelwert ihrer Verteilung null und die Varianz eins ist, so erhält man die Observablen m_n und e_n. Deren zweidimensionale Verteilung hat nach [4] eine universelle Form. Das gleiche gilt natürlich auch für die Histogramme der einzelnen Observablen. Das heißt, daß man durch den Vergleich dieser Verteilungen mit denen eines Referenz-Modells dessen Universalitätsklasse bekannt ist, die Universalitätsklasse bestimmen kann. Diese haben den Vorteil, daß man nicht nur einzelne Momente der Verteilung vergleicht, wie z. B. die Suszeptibilität, sondern daß mit der Äquivalenz der Verteilungen alle Momente der Verteilungen miteinander verglichen werden können. Gibt es jedoch sogenannte "Corrections to Scaling", die von irrelevanten Skalenvariablen hervorgerufen werden, so gelten diese Aussagen nur im thermodynamischen Limes.

Die Bedeutung der "Drehung" im Raum der Observablen kann auch noch anders verstanden werden, indem man die Hamitonfunktion $\mathcal{H}$ durch diese neuen Observablen ausdrückt:

$$\begin{aligned} \beta\mathcal{H}/V &= \beta e + hm \\ &= \beta[\sin(\alpha)m_r + \cos(\alpha)e_r] + h[\cos(\alpha)m_r - \sin(\alpha)e_r] \\ &= [\cos(\alpha)\beta - \sin(\alpha)h]e_r + [\sin(\alpha)\beta + \cos(\alpha)h]m_r \\ &\equiv \beta_r e_r + h_r m_r. \end{aligned} \tag{2.56}$$

Damit wird klar, daß man diese Drehung (s. Abb. 2.7) auch im Raum der Kopplungen veranschaulichen und die eingezeichneten Richtungen als die neuen Skalenvariablen identifizieren kann.

Mit diesen transformierten Variablen kann man nach [2] ein allgemeines Verfahren zur Bestimmung eines Endpunktes angeben. Dafür werden noch zwei weitere Observablen definiert. Die eine gibt die Abweichung senkrecht zur Linie des Phasenüberganges erster Ordnung an, und ist

$$B_r^3 \equiv \frac{<(\Delta m_r)^3>}{<(\Delta m_r)^2>^{\frac{3}{2}}}. \tag{2.57}$$

Der Nenner ist in der Stochastik als sogenannte "Skewness" bekannt, und mißt die Symmetrie der Verteilung um den Mittelwert. Da eine Definition der pseudokritischen Kopplung $\beta_{c,L}$ durch das "equal weight Kriterium" des Histogrammes vom Ordnungsparameter gegeben ist, sollte der Wert dieser Observable bei der kritischen Temperatur verschwinden. Deswegen parametrisiert B_r^3 die Abweichung von der kritischen Temperatur. Die zweite Observable ist die Binder-Kumulante

$$B_r^4 \equiv \frac{< (\Delta m_r)^4 >}{< (\Delta m_r)^2 >^2}. \tag{2.58}$$

Diese hat die schon beschriebene Eigenschaft, am kritischen Punkt unabhängig von der Gittergröße zu sein. Da diese Voraussetzung aber nur bei H_c gegeben ist, ist der kritische Wert des äußeren Feldes durch den Schnittpunkt bei verschiedenen Gittergrößen und Feldern dieser Observablen gegeben. Da der Wert der Kumulante aus der universellen Form der Verteilung von Δm_r gewonnen werden kann, ist dieser Wert auch wieder eine universelle Größe. Damit ist das Verfahren zur Bestimmung des kritischen Endpunktes klar. Man bewegt sich mit Hilfe von B_r^3 auf der Linie des Phasenüberganges erster Ordnung und mißt darauf B_r^4. Trägt man diese für verschiedene äußere Felder und Gittergrößen auf, so markiert der Schnittpunkt dieser Linien den Wert des kritischen Feldes.

Kapitel 3

Numerische Methoden

3.1 Monte-Carlo Simulation

Monte-Carlo-Simulationen werden durchgeführt, um die Erwartungswerte thermodynamischer Observablen zu berechnen. Diese sind in der statistischen Mechanik durch

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

mit der Gibbs's Verteilung $P(\phi)$ des Zustandes $\phi = \{\sigma_i\}$ gegeben. Nun wächst die Zahl der Zustände exponentiell mit der Größe des Systems und man kann die Summe nicht mehr voll ausführen. Deswegen wählt man die Monte-Carlo Methode, um eine Schätzung für diese Erwartungswerte zu bekommen. Dabei werden N zufällige und unabhängige Konfigurationen ϕ_k gewählt, auf denen man die Observable berechnet. Diese Werte werden mit dem Gewicht der Konfiguration multipliziert und ergeben als Summe eine Schätzung für die Observable. Der Nachteil dieser Methode ist, daß viele Konfigurationen durch den Boltzmann-Faktor nur ein sehr geringes Gewicht bekommen, was insgesamt die Schätzung verschlechtert. Eine verbesserte Methode benutzt das sogenannte Importance Sampling, bei dem die Zustände ϕ_k schon gemäß ihrer Gewichtung generiert werden. Dann läßt sich der Erwartungswert durch

$$< O >= \lim_{N\to\infty} \frac{1}{N} \sum_{k=1}^{N} O(\{\sigma_i\}_k) \tag{3.2}$$

bestimmen.

3.1.1 Theorie der Markoff-Ketten

Diese Theorie beruht im wesentlichen auf dem Ergodensatz der Stochastik. Dafür betrachte eine stochastische Matrix $\mathcal{P}$, deren Spaltensumme eins ist. Dann interpretiert man dessen Matrixelement $\mathcal{P}_{ij}$ als Wahrscheinlichkeit im nächsten Zeitschritt von der Konfiguration ϕ_j zur Konfiguration ϕ_i zu gelangen. Dabei ist es wesentlich, daß diese Wahrscheinlichkeit nicht von den Konfigurationen abhängt, von denen man in die Konfiguration ϕ_j gelangt ist, d. h. unabhängig von den vorhergehenden Zeitschritten ist. Das N-fache Produkt dieser Matrizen interpretiert man dann als N aufeinanderfolgende Zeitschritte. Desweiteren braucht man noch eine Verteilung p, deren Element p_i die Wahrscheinlichkeit angibt, daß sich das System in der Konfiguration ϕ_i befindet. Der Ergodensatz besagt, falls es ein $N \in \mathcal{N}$ gibt, mit der die Matrix $\mathcal{P}^N$ strikt positive Einträge hat, so gibt es einen Vektor ρ für den

$$\mathcal{P}\rho = \rho \tag{3.3}$$

gilt. Diese ist dann eine stationäre Verteilung. Desweiteren besagt er, daß man sich dieser Verteilung von jeder beliebigen Startverteilung p' aus mit der Zeit asymptotisch annähert, d. h. es gilt

$$\lim_{N\to\infty} \mathcal{P}^N p' = \rho. \tag{3.4}$$

Man kann also eine beliebige Startkonfiguration (wie z. B. $p'_i = \delta(i,0)$) wählen und gelangt dann durch die Markoff-Prozesse automatisch in eine stationäre Verteilung. Damit diese die geforderte Gibb's Verteilung ist, muß zusätzlich die hinreichende Bedingung des Detailed Balance erfüllt sein. Sie ist über

$$\mathcal{P}_{ij} \exp(-\beta\mathcal{H}(\phi_j)) = \mathcal{P}_{ji} \exp(-\beta\mathcal{H}(\phi_i)) \tag{3.5}$$

definiert, d. h. die Wahrscheinlichkeit die Konfiguration ϕ_j vorzufinden und dann zur Konfiguration ϕ_i zu gelangen, ist gleich der Wahrscheinlichkeit erst die Konfiguration ϕ_i vorzufinden und dann zur Konfiguration ϕ_j zu gelangen. Daß dies die geforderte stationäre Verteilung liefert, kann man nach der Summierung dieser Bedingung über i sehen. Das Problem der Generierung einer Folge von Zufallskonfigurationen gemäß der Gibb's Verteilung ist damit auf das Problem zuruckgeführt eine ergodische, stochastische Matrix zu finden, die das Detailed Balance erfüllt. Dies wird, wie man sich leicht überzeugen kann, durch die Vorschrift

$$\mathcal{P}_{ij} = \alpha_{trial}\alpha_{accept} \tag{3.6}$$

mit

$$\alpha_{accept} = \min\left[1, \frac{P(\phi_j)}{P(\phi_i)}\right] \tag{3.7}$$

$$\alpha_{trial} = \alpha_{trial}(\phi_i \to \phi_j) \tag{3.8}$$

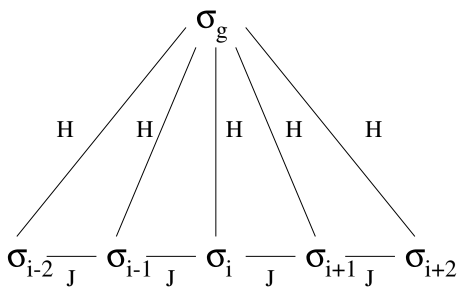


Abbildung 3.1: Kopplung der Spins

gewährleistet. Dabei ist die Wahl von α_{trial}, d. h. der Wahrscheinlichkeit bei einer gegebene Konfiguration ϕ_i eine neue Konfiguration ϕ_j zu wählen, im wesentlichen beliebig, sie sollte jedoch symmetrisch sein. Das Problem bei dieser Art der Erzeugung von Zufallskonfigurationen, liegt meist darin, daß die Akzeptanzrate zu klein wird, wenn man sich in einem lokalen Minimum der Energie befindet. Dort kommt man dann nur schwer wieder hinaus, um eventuell zu einem globalen Minimum zu gelangen. Deswegen benutzt man dieses Verfahren meistens nur für lokale Änderungen des Gitters. Die Ergodizität bleibt nach einem kompletten Sweep über das Gitter erhalten. Einen Algorithmus, der eine immer gleichbleibende Akzeptanzrate hat, ist der in Kap. 3.2 beschriebene Wolff-Clusteralgorithmus.

3.2 Der Wolff Clusterupdate mit äußerem Feld

Der von Wolff vorgeschlagene Algorithmus [15] ist ein Spezialfall des von Swendsen und Wang in [16] entwickelten Algorithmus, und beruht auf einer alternativen Formulierung der Zustandssumme. Dazu betrachte erneut die Hamiltonfunktion

$$\begin{aligned}\mathcal{H} &= -J\sum_{<i,j>}\delta(\sigma_i,\sigma_j) - H\sum_{i=1}^{V}\delta(\sigma_i,\sigma_g) \\ &\equiv -\sum_{<i,j>'}J(i,j)\delta(\sigma_i,\sigma_j) \\ &= \underbrace{-\sum_{<i,j>''}J(i,j)\delta(\sigma_i,\sigma_j)}_{\equiv\mathcal{H}_{l,m}} - J(l,m)\delta(\sigma_l,\sigma_m)\end{aligned} \tag{3.9}$$

mit

$$J(i,j) = \begin{cases} H & \text{falls } j = g \\ J & \text{sonst} \end{cases} . \tag{3.10}$$

Das $< i,j >'$ soll andeuten, daß die Summe nicht nur über die nächsten Nachbarn geht, sondern auch immer über den sogenannten Ghostspin σ_g. Diesen kann man also als zusätzlichen Spin ansehen, der in direkter Nachbarschaft zu allen anderen Spins steht. In zwei Dimensionen kann man sich dieses wie in Abb. 3.1 vorstellen. In der dritten Zeile soll bei der Summation über $< i,j >''$ die Wechselwirkung zwischen den beliebigen aber festen benachbarten Spins σ_l und σ_m weggelassen werden. Damit wird nun aus der Zustandssumme

$$
\begin{aligned}
Z &= \sum_{\{\sigma_i\}} e^{\beta\mathcal{H}_{lm}} e^{\beta J(l,m)\delta(\sigma_l,\sigma_m)} && (3.11)\\
&= \delta(\sigma_l,\sigma_m) \sum_{\{\sigma_i\}} e^{\beta\mathcal{H}_{lm}} e^{\beta J(l,m)} + [1-\delta(\sigma_l,\sigma_m)] \sum_{\{\sigma_i\}} e^{\beta\mathcal{H}_{lm}} && (3.12)\\
&= e^{\beta J(l,m)} \left\{ [1-e^{-\beta J(l,m)}] Z(\sigma_l=\sigma_m) + e^{-\beta J(l,m)} Z(\sigma_l,\sigma_m) \right\} && (3.13)
\end{aligned}
$$

mit

$$
\begin{aligned}
Z(\sigma_l=\sigma_m) &\equiv \sum_{\{\sigma_i\}} \exp(\beta\mathcal{H}_{lm})\delta(\sigma_l,\sigma_m) && (3.14)\\
Z(\sigma_l,\sigma_m) &\equiv \sum_{\{\sigma_i\}} \exp(\beta\mathcal{H}_{lm}). && (3.15)
\end{aligned}
$$

Der erste Term hat die Beschränkung, daß die beiden benachbarten Spins σ_l und σ_m gleich sind. Der zweite weist keinerlei Beschränkung auf und bildet den Beitrag aller anderen Links zur Zustandssumme. Damit kann man den Faktor

$$
p_{add} = 1 - e^{\beta J(l,m)} = \begin{cases} 1-e^{\beta J} & \text{falls } m \neq g \\ 1-e^{\beta H} & \text{falls } m = g \end{cases} \qquad (3.16)
$$

als Wahrscheinlichkeit für eine Verbindung zwischen diesen Spins ansehen. Damit wird der Algorithmus zur Erzeugung von neuen Konfigurationen klar:

- Wähle einen neuen zufälligen Spinzustand σ_n und einen zufälligen Startpunkt $\vec{r}$ im Gitter.
- Nehme alle Nachbarn von $\vec{r}$, die im gleichen Spinzustand sind, mit der Wahrscheinlichkeit p_{add} in den Cluster auf.
- Verfahre mit allen Spins im Cluster wie im vorherigen Punkt.
- Setze alle Spins im Cluster auf den neuen Zustand σ_n

Die Ergodizität dieses Algorithmus ist offensichtlich, da immer die Chance besteht, daß der Cluster aus nur einem Spin besteht und dann, nach endlich vielen solcher Cluster-Updates, das gesammte Gitter in jeden beliebigen Zustand gelangen kann. Dabei kann es aber vorkommen, daß zwei hintereinander erzeugte Konfigurationen sehr ähnlich sind. Um möglichst unabhängige Konfigurationen zu erhalten, wurden die Berechnung der Observablen in dieser Arbeit nach jeweils 1000 Cluster-Updates durchgeführt.

3.3 Numerische Fehlerbehandlung

3.3.1 Critical Slowing Down Autokorrelationen

Die mit Hilfe der durch die Markoff-Prozeße gewonnen Konfigurationen und die auf ihnen berechneten Observablen sind nicht immer völlig unabhängig. Bei endlichen Ketten trägt dies zur Abschätzung des Fehlers bei, denn die Zahl unabhängiger Konfigurationen wird dadurch verringert. Ein Maß dafür ist die sogenannte Autokorrelationszeit. Hat man N verschiedene Konfigurationen ϕ_i erzeugt und auf ihnen die Observable $O(\phi_i) \equiv O_i$ berechnet, so ist die Autokorrelationsfunktion wie folgt definiert,

$$\Gamma(t) = < (O_i - < O >_\infty)(O_{i+t} - < O >_\infty) > \tag{3.17}$$

wobei $< O >_\infty = \lim_{N\to\infty} \frac{1}{N} \sum_{i=1}^{N} O_i$ der wahre Mittelwert ist. Betrachtet man nun den statistischen Fehler auf dieser Oberservablen

$$\begin{aligned}
\sigma^2 &= < \left([\frac{1}{N} \sum_{i=1}^{N} O_i] - < O >_\infty \right)^2 > \qquad (3.18)\\
&= \frac{1}{N^2} \sum_{i,j} < (O_i - < O >_\infty)(O_j - < O >_\infty) > \\
&= \sum_{t=-N}^{t=N} \frac{N-t}{N^2} \Gamma(t) \\
&= 2\frac{\Gamma(0)}{N} \left[\frac{1}{2} + \sum_{t=1}^{N} \left(1 - \frac{|t|}{N} \right) \frac{\Gamma(t)}{\Gamma(0)} \right] \\
&\equiv \Gamma(0) \frac{2\tau_{int}}{N}, \qquad (3.19)
\end{aligned}$$

so sieht man, daß dieser durch die sogenannte integrierte Autokorrelationszeit τ_{int} vergrößert wird. Der Effekt des Critical Slowing Down bedeutet nun, daß diese mit

$$\tau_{int} \propto L^z \tag{3.20}$$

divergiert, d.h. am kritischen Punkt wächst die Korrelation mit der Gittergröße. Deswegen wird man immer auch korrelierten Daten bekommen. Der Faktor z wird auch dynamischer kritischer Exponent genannt, und ist auch vom Algorithmus abhängig. Darin liegt dann der eigentliche Vorteil der Cluster-Algorithmen. So beträgt der kritische Exponent z für das zweidimensionale drei Zustands Potts-Modell nur 0.6 statt $z = d$ wie für übliche lokale Monte-Carlo Updates [16].

3.3.2 Jackknife-Methode

Eine weniger verzerrte Schätzung für den Erwartungswert von korrelierten Daten als den naiven Mittelwert nach (3.2) kann man mit der Jackknife-Methode bekommen. Dafür teilt man den Datensatz der Länge N in n Blöcke mit gleicher Länge N' ein, d. h. es gilt $N = n$ N'. Dann bekommt man n Unterdatensätze, indem man aus dem Originaldatensatz jeweils einen der Blöcke wegläßt. Dabei muß man bei der Wahl der Blocklänge darauf achten, daß der jeweilige Block N' länger als die Autokorrelationszeit ist. Bezeichnet man den Erwartungswert der Observable O auf dem ganzen Datensatz mit $\bar{O}$ und auf den Unterdatensätzen mit $\bar{O}_i$, so erhält man die sogenannten Pseudowerte des Jackknifes durch

$$J_i = n\bar{O} - (n-1)\bar{O}_i. \tag{3.21}$$

Dann erhält man die neue Schätzung des Erwartungswertes

$$\begin{aligned} J &= \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n} J_i & (3.22)\\ &= n\bar{O} - (n-1)\hat{O} & (3.23) \end{aligned}$$

mit $\hat{O} = \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}\bar{O}_i$ Der neue Fehler auf dieser Variable ist dann durch

$$\begin{aligned} \sigma^2 &= \frac{1}{n(n-1)}\sum_{i=1}^{n}(J_i - J)^2 & (3.24)\\ &= \frac{n-1}{n}\sum_{i=1}^{n}\left(\bar{O}_i - \hat{O}\right)^2 & (3.25)\\ &= \frac{n-1}{n}\left(\sum_{i=1}^{n}\bar{O}_i^2 - n\hat{O}^2\right) & (3.26) \end{aligned}$$

gegeben. Anhand dessen erkennt man, daß mit der Jackknife-Methode auch eine Fehlerabschätzung von Observablen möglich ist, bei denen τ_{int} nicht ermittelbar ist.

3.4 Die Multi-Histogramm Methode

Mit den bisherigen Mitteln war es nur möglich, für feste Werte von J und H die Erwartungswerte zu bestimmen. Sucht man jedoch z. B. nach einem Peak in der Suszeptibilität, um damit das Skalenverhalten zu analysieren, so muß man verschiedene Werte von J und H durchfahren, um das Maximum zu bestimmen. Dabei wird dann der Fehler durch die für jedes Kopplungspaar gesammelte Statistik festgelegt. Ein Verfahren, welches nun erlaubt, bei einer gegebenen Verteilung der Observablen $O(J,H)$ den Erwartungswert an anderen Kopplungen zu berechenen, wurde von Ferrenberg und Swendsen in [17] vorgeschlagen. Es beruht auf der Beobachtung, daß die Wahrscheinlichkeitsverteilung durch die Zustandsdichte $W(E,M)$ der beiden Beiträge zur Hamiltonfunktion bestimmt wird und diese unabhängig von den Kopplungen ist. In ihr steckt jedoch die vollständige thermodynamische Information des Systems und kann zumindest prinzipiell mit Hilfe einer unendlich langen Simulation an einem einzigen Punkt des Kopplungsraumes bestimmt werden. Definiert ist sie über die Anzahl der Konfigurationen $\{\sigma_i\}$ mit den jeweiligen Werten von E und M

$$W(E,M) = \sum_{\{\sigma_i\}} \delta\left(E - E(\{\sigma_i\})\right) \;\; \delta\left(M - M(\{\sigma_i\})\right). \tag{3.27}$$

Die Zustandssumme läßt sich mit ihr durch

$$Z(J,H) = \sum_{\{\sigma_i\}} e^{-\beta[JE(\{\sigma_i\})+HM(\{\sigma_i\})]} = \sum_{E,M} W(E,M) e^{-\beta[JE+HM]} \tag{3.28}$$

berechnen. Die Wahrscheilichkeitsverteilung $P_{J,H}(E,M)$ ist dann

$$P_{J,H}(E,M) = \frac{1}{Z(J,H)} W(E,M) e^{-\beta[JE+HM]}. \tag{3.29}$$

Aus den Simulationen gewinnt man nun $N_{J,H}$ Messwerte von E und M, aus welchen man dann eine Verteilung $\mathcal{N}_{J,H}(E,M)$ erstellt. Nach dem Gesetz der großen Zahlen gilt

$$\frac{\mathcal{N}_{J,H}(E,M)}{N_{J,H}} \underset{N_{J,H}\to\infty}{\longrightarrow} P_{J,H}(E,M). \tag{3.30}$$

Schreibt man die Zustandssumme

$$Z(J',H') = \sum_{E,M} W(E,M) e^{-\beta(J'E+H'M)} \tag{3.31}$$

für die neuen Kopplungen J' und H' mit Hilfe von (3.28) und (3.29) um, so erhält man

$$Z(J',H') = Z(J,H) \sum_{E,M} P_{J,H}(E,M) e^{-\beta[(J'-J)E+(H'-H)M]}. \tag{3.32}$$

Bildet man die Quotienten von (3.29) für diese beiden Kopplungen, so ergibt sich

$$\frac{P_{J',H'}(E,M)}{P_{J,H}(E,M)} = \frac{Z(J,H)}{Z(J',H')} e^{-\beta[(J'-J)E+(H'-H)M]}. \tag{3.33}$$

Die Gleichung (3.32) eingesetzt ergibt

$$\begin{aligned} P_{J',H'}(E,M) &= P_{J,H}(E,M)\frac{Z(J,H)}{Z(J',H')} e^{-\beta[(J'-J)E+(H'-H)M]} \\ &= \frac{P_{J,H}(E,M)e^{-\beta[(J'-J)E+(H'-H)M]}}{\sum_{E',M'} P_{J,H}(E',M')e^{-\beta[(J'-J)E'+(H'-H)M']}}.\end{aligned} \tag{3.34}$$

Benutzt man noch zweimal (3.30), so erhält man schließlich

$$\begin{aligned} P_{J',H'}(E,M) &= \frac{\mathcal{N}_{J,H}(E,M)}{N_{J,H}} \frac{e^{-\beta[(J'-J)E+(H'-H)M]}}{\sum_{E',M'} \frac{\mathcal{N}_{J,H}(E',M')}{N_{J,H}} e^{-\beta[(J'-J)E'+(H'-H)M']}} \\ &= \frac{\mathcal{N}_{J,H}(E,M)e^{-\beta[(J'-J)E+(H'-H)M]}}{\sum_{E',M'} \mathcal{N}_{J,H}(E',M')e^{-\beta[(J'-J)E'+(H'-H)M']}}.\end{aligned} \tag{3.35}$$

Damit ist die rechte Seite unabhängig von den neuen Kopplungen und man kann mit der so gewonnenen neuen Wahrscheinlichkeitsverteilung die Erwartungswerte für die neuen Kopplungen durch

$$< O >_{J',H'} = \sum_{E,M} O(E,M) P_{J',H'}(E,M) \tag{3.36}$$

berechnen. Dabei ist mit $O(E,M)$

$$O(E,M) = \frac{1}{W(E,M)} \sum_{\{\sigma\}} O(\{\sigma_i\})\delta(E(\{\sigma\}) - E)\delta(M(\{\sigma\}) - M) \tag{3.37}$$

gemeint. Da die Simulationen bei festen Kopplungen immer endlich sind, kann man mit ihnen nicht den gesamten Zustandsraum erfassen. Damit fehlt die Information über die Zustandsdichte für bestimmte E und M Kombinationen. Diese kann man eventuell bei anderen Werten der Koppplungen besser erhalten. Die Multihistogramm-Methode ermöglicht es dann, aus den Simulationen bei verschiedenen Kopplungswerten, eine gemeinsame und verbesserte Zustandsdichte zu extrahieren. Dabei sollte man aber bei der Auswahl der Kopplungen darauf achten, daß sich die Histogramme der Energie und der Magnetisierung möglichst um nicht mehr als deren Halbwertsbreite unterscheiden, um eine Interpolation zu ermöglichen. Angenommen man hat Simulationen bei den Kopplungen $((J_1, J_2, ...J_R), (H_1, H_2, ..., H_R))$ gemacht. Dann folgt aus (3.29) und (3.30)

$$\begin{aligned} W_l(E,M) &= \frac{\mathcal{N}_{J_l,H_l}(E,M)}{N_{J_l,H_l}} Z(J_l,H_l)e^{\beta[J_lE+H_lM]} \\ &= \frac{\mathcal{N}_{J_l,H_l}(E,M)}{N_{J_l,H_l}} e^{\beta[-F(J_l,H_l)+J_lE+H_lM]}.\end{aligned} \tag{3.38}$$

Addiert man diese mit verschiedenen Gewichten $p_l(E,M)$ zusammen, so erhält man eine neue Schätzung für die Zustandsdichte

$$W(E,M) = \sum_{l=1}^{R} p_l(E,M) W_l(E,M). \tag{3.39}$$

Dabei muß natürlich $\sum_{l=1}^{R} p_l(E,M) = 1$ erfüllt sein. Die Freiheit bei der Wahl der Gewichte $p_l(E,M)$ nutzt man, um den Fehler der Zustandssumme zu minimieren. In [18] wird gezeigt, daß

$$p_l(E,M) = \frac{g_l^{-1} N_{J_l,H_l} e^{-\beta[-F(J_l,H_l)+J_l E+H_l M]}}{\sum_{k=1}^{R} g_k^{-1} N_{J_k,H_k} e^{-\beta[-F(J_k,H_k)+J_k E+H_k M]}} \tag{3.40}$$

mit $g_l = 1 + 2\tau_{int,l}$ diese Forderung erfüllt. Dies wieder eingesetzt, ergibt für die Zustandsdichte

$$W(E,M) = \frac{\sum_{l=1}^{R} \mathcal{N}_{J_l,H_l}(E,M) g_l^{-1}}{\sum_{k=1}^{R} g_k^{-1} N_{J_k,H_k} e^{-\beta[-F(J_k,H_k)+J_k E+H_k M]}} \tag{3.41}$$

und die Zustandssumme

$$Z(J_l,H_l) = \sum_{E,M} W(E,M) e^{-\beta[J_l E+H_l M]} = e^{-\beta F(J_l,H_l)}. \tag{3.42}$$

Mit den letzten beiden Gleichungen kann dann iterativ die freie Energie selbstkonsistent bestimmt werden. Dabei setzt man die freie Energie der ersten Simulation auf Null, da die freie Energie nur bis auf eine Konstante bestimmt ist. Zusammenfassend wird die Observable O bei einem neuen Punkt im Kopplungsraum nun mit (3.36) berechnet, wobei $P_{J',h'}$ durch (3.29) mit (3.42) und (3.41) gegeben ist, und $O(E,M)$ durch

$$O(E,M) = \sum_{l=1}^{R} \sum_{\{\sigma_i\}} \frac{\delta(E - E(\{\sigma_i\}))\delta(M - M(\{\sigma_i\}))O(\{\sigma_i\})g_l^{-1}}{\sum_{k=1}^{R} \sum_{\{\sigma_i\}} \delta(E - E(\{\sigma_i\}))\delta(M - M(\{\sigma_i\}))g_k^{-1}} \tag{3.43}$$

ermittelt wird.

Kapitel 4

Numerische Resultate

In den numerischen Simulationen rechnet man nur in dimensionslosen Größen. Da die Temperatur immer mit den Kopplungen auftritt, wie z. B. im Boltzmanngewicht*

$$
\begin{aligned}
-\beta\mathcal{H} &= \beta J \sum_{<i,j>} \delta(\sigma_i, \sigma_j) + \beta H \sum_{i=1}^{V} \delta(\sigma_i, \sigma_g) \\
&\equiv \beta \sum_{<i,j>} \delta(\sigma_i, \sigma_j) + h \sum_{i=1}^{V} \delta(\sigma_i, \sigma_g) \qquad (4.1)
\end{aligned}
$$

kann man mit dieser die Kopplungen in dimensionslose Größen umwandeln. Von nun an sind deshalb mit Kopplungen immer diese Größen gemeint.

4.1 Überprüfung des Algorithmus und Allgemeines zur Auswertung der Daten

Als erstes wurde der Algorithmus ohne äußeres Feld überprüft. Die dabei erhaltenen Ergebnisse z. B. für die kritische Temperatur, das Skalenverhalten der Energie etc. waren mit den publizierten älteren Ergebnissen vergleichbar (s. z.B. [9]). Danach wurden dann erste Simulationen mit äußerem Feld gemacht, die mit denen von DeGrand und DeTar in [6] verglichen werden konnten. In dieser Arbeit haben sie hauptsächlich ein Gitter mit 30^3 Gitterplätzen simuliert, und anhand des Kriteriums eines verschwindenen zwei Zustandssignal einer dem Ordnungsparameter

*Durch den Erwartungswert dieser Größe ist ab nun auch die innere Energie u definiert. Sie unterscheidet sich von der ursprünglich Definition nur um einen Faktor $\frac{1}{T}$

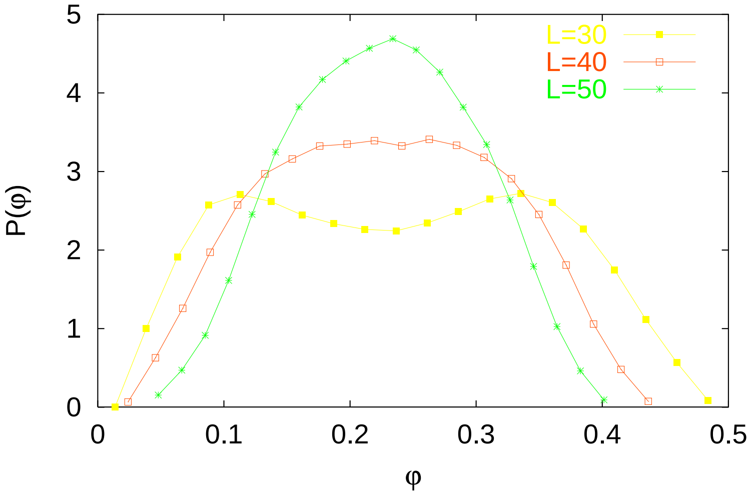


Abbildung 4.1: Verteilung des Ordnungparameters ϕ bei h=0.0015 und $\beta_{c,L}$. Die Abbildung wurde nur mit den Daten für h=0.0015 erstellt und die Fläche unter dem Histogramm ist auf auf eins normiert.

ϕ ähnlichen Observable, den Endpunkt der Phasenübergangslinie bestimmt. Das Ergebnis war für dieses Gitter eine verschwindende Doppelpeakstruktur zwischen h=0.0015 und h=0.003. Um die Finite Size Effekte abzuschätzen, haben sie noch ein Gitter mit 20^3 Gitterplätzen simuliert. Anhand dessen wurden die Finite Size Effekte als gering eingestuft und der kritische Endpunkt mit $0.0015 < h_c < 0.015$ angegeben. Um diese Ergebnisse zu überprüfen, wurde auch in dieser Arbeit ein Gitter mit 30^3 Gitterplätzen bei h=0.0015 und h=0.002 simuliert. Die damit erzielten Ergebnisse sind dabei vergleichbar. So verschwindet z. B. der Doppelpeak auf einem Gitter mit 30^3 Gitterplätzen bei h=0.002 schon fast vollständig. Jedoch sind die Finite Size Effekte bei diesen Gittern nicht wie behauptet klein. Betrachtet man Abb. 4.1, so erkennt man, daß die Doppelpeakstruktur schon bei h=0.0015 nahezu verschwindet, wenn man nur ein Gitter mit 40^3 Gitterplätzen nimmt. Bei einem Gitter mit 50^3 Gitterplätzen existiert dann zweifelsohne keine Doppelpeakstruktur mehr. Deswegen kann man annehmen, daß bei diesen Gittergößen noch starke Finite Size Effekte zu sehen sind.

Desweiteren wurden diese Ergebnisse noch mit Hilfe eines Heatbath-Update und eines Metropolis-Update überprüft und verifiziert. Weil sich inzwischen herausgestellt hat, daß ein 30^3 Gitter für die hier betrachteten Observablen schon ohne äußeres Feld zu klein ist (s. dazu [19]), geht es in die folgenden Untersuchungen nicht mehr ein.

Nach dieser Überprüfung wurde begonnen, den kritischen Endpunkt zu suchen (s. Kap. 4.2). Dafür wurden mit den Gittergrößen L=40, 50, 60, und 70 und bei Werten der Kopplung h von 0.0005 bis 0.0010 bei jeweils verschiedenen Kopplungen β Simulationen durchgeführt. Mit Ausnahme des L=70 Gitters wurde noch bei h=0.0011, 0.0015, 0.0017 und h=0.002 gemessen. Die Auswahl der jeweiligen β Kopplungen wurde darauf ausgerichtet, möglichst gleich in der Nähe der kritischen Kopplung $\beta_{c,L}$ für das jeweilige Gitter zu simulieren. Sämtliche Simulationen wurden dabei auf dem DEC-Alpha Cluster mit bis zu 7 Rechnern durchgeführt und dauerten je nach Gittergröße, Kopplungen, Anzahl von Iterationen und Rechner von einigen Tagen bis zu 4 Wochen.

Als Startbedingungen für diese Simulationen wurde die geordnete Konfiguration ausgewählt, da sich diese bei der Thermalisierung als besonders günstig erwies. Es hat sich auch als ausreichend herausgestellt, bei der Analyse nach Ferrenberg-Swendsen die ersten 500000 Cluster-Updates wegzulassen. Dies wurde für alle Gittergrößen konstant gelassen, da die Autokorrelationszeiten für alle Gittergrößen und alle Kombinationen der Kopplungen weit darunter lagen. Dabei erkennt man auch, daß die Autokorrelationszeiten für größere h-Kopplungen deutlich kleiner wurden, da dadurch die Größe der Cluster deutlich zunahm. Andererseits wurde aber auch die benötigte Zeit für einen Update wesentlich länger. Dies trifft insbesondere auf das größte Gitter zu. Deswegen wurden für dieses keine größeren h-Kopplungen mehr simuliert. Die genauen Daten zu den jeweiligen Simulationen befinden sich im Anhang A.

Die gesamte Auswertung beruht auf der Multihistogramm-Methode. Zu dieser wurden immer sämtliche in Anhang A aufgeführten Simmulationen der jeweiligen Gitter benutzt. Desweiteren wurden alle Fehler durch eine Jackknife-Analyse ermittelt. Dabei hat sich herausgestellt, daß hierfür eine Blockanzahl von 10 ausreichend ist.

4.2 Bestimmung des Endpunktes

Als erstes muß man untersuchen, bei welcher h-Kopplung der gesuchte kritische Punkt liegt. Dafür wurde zunächst nach dem Ende des erwarteten Verhaltens für einen Phasenübergang erster Ordnung gesucht und der Beginn des Crossover-Verhaltens bestimmt. Die Ergebnisse dazu sind in Kapitel 4.2.1 aufgeführt. Es stellte sich dabei jedoch heraus, daß die dafür benutzten Gittergrößen zu klein waren, um eine erfolgreiche Extrapolation zum thermodynamischen Limes durchführen zu können. Außerdem zeigt das Verschwinden der latenten Wärme das Ende des Phasenüberganges erster Ordnung bei wesentlich kleineren h-Feldern und Gittergrößen an (s. Kap. 4.2.2). Deswegen kann aus diesem Kriterium nur eine grobe maximale Obergrenze gewonnen werden. Die genaueste Bestimmung konnte dann mit der in Kapitel 2.4 beschriebenen Methode der Basistransformation erzielt werden. Die damit erzielten Ergebnisse werden gesondert ab Kapitel 4.2.3 beschrieben.

4.2.1 Veränderung des Skalierungsverhaltens entlang der Phasenübergangslinie

Für den Wertebereich der h-Kopplung, in dem das Potts-Modell einen Phasenübergang erster Ordnung hat, sollten die Suszeptibilität und die spezifische Wärme bei $\beta_{c,L}$ mit dem Volumen skalieren (Gl. (2.39)ff). Dieses Verhalten sollte sich dann beim kritischen Wert von h ändern, wo das System ein der Universalitätsklasse entsprechendes Skalenverhalten zeigen sollte. Bei noch größeren Werten von h erwarten man keinerlei Skalenverhalten dieser Observablen mehr, da dann kein Phasenübergang mehr stattfindet. All diese Argumente gelten natürlich nur für ausreichend große Gitter. Dabei ist die Größe, die als ausreichend angesehen werden kann, a priori nicht bekannt. Meistens kann man nur erkennen, daß ein bestimmtes Verhalten nicht mehr vorliegt, so daß daraus Obergrenzen für die kritische Kopplung h getroffen werden. So ist das Kriterium des Crossover erst eindeutig erfüllt, wenn bei festem Wert der Kopplung h zumindest die zwei größten Gitter den gleichen Wert für das Maximum der Suszeptibilität oder der spezifischen Wärme liefern. Es ist aber nicht vorherzusagen, ob dies bei größeren Gittern nicht schon bei kleineren Werten von h der Fall ist. Umgekehrt gilt das gleiche für den Bereich des Phasenüberganges erster Ordnung und der erwarteten Skalierung dieser Größe mit dem Volumen.

Teilt man das Maximum der Suszeptibilität und der spezifischen Wärme durch das Volumen und trägt diese Werte für die benutzten Gittergrößen gegen h auf, so erhält man Abb. 4.2. Wie oben angeführt, sollte dann der so normierte Wert dieser Observablen nach Gl. 2.39 und Gl. 2.40 volumenunabhängig sein. Wie man an den Abbildungen erkennt, ist dies innerhalb der Fehler nur für die beiden größten Gitter bis h=0.0003 der Fall.

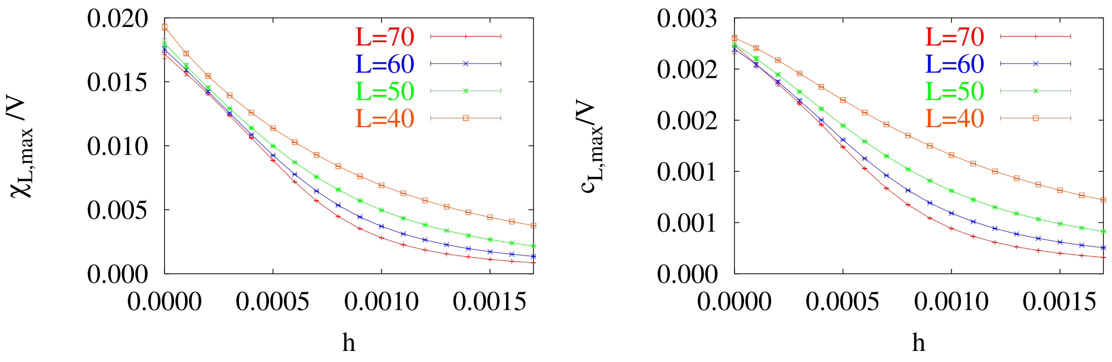


Abbildung 4.2: Verlauf des Maximums der Suszeptibilität (links) und der spezifischen Wärme (rechts). Beide Observablen wurden durch das entsprechende Volumen geteilt.

Betrachtet man das Crossover-Kriterium anhand der Abb. 4.3, so ist dies bei h=0.0017 und für die Gittergrößen ab L=60 das erste Mal erfüllt. Bei h=0.0020 ist dies auch für die Gittergrößen ab L=50 der Fall. Beide Angaben sind aber noch mit dem Fehler behaftet, daß zu den entsprechenden Werten von h mit Hilfe der Ferrenberg-Swendsen Analyse extrapoliert werden mußte. Es hat sich aber mit Hilfe der kleineren Gitter gezeigt, daß Extrapolationen dieser Art relativ zuverläßig funktionieren. Insgesamt ergibt sich deshalb aus diesen Beobachtungen einen Bereich für die kritische Kopplung von $0.0003 < h_c < 0.0017$

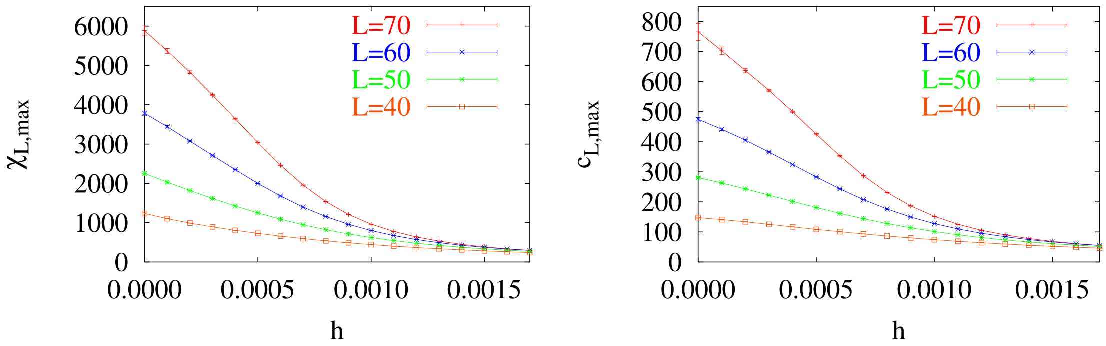


Abbildung 4.3: Verlauf des Maximums der Suszeptibilität (links) und der spezifischen Wärme (rechts)

4.2.2 Verschwindende latente Wärme

Wie in Kapitel 2.1 ausgeführt, findet die latente Wärme ihren Ausdruck in der Doppelpeakstruktur des Histogramms der inneren Energie u. Diese erstellt man für verschiedene Gittergrößen bei der Kopplung $\beta_{c,L}$ bei fester Kopplung h. Dabei werden die $\beta_{c,L}$ danach bestimmt, daß die beiden Peaks der Histogramme gleiche Höhe haben. Zusätzlich wurden deren Peakmaxima auf 1 normiert, um die Abhängigkeit des Histogrammes von der Gittergröße zu verdeutlichen. Dann kann man an ihnen abschätzen, ob die Doppelpeakstruktur im thermodynamischen Limes noch erhalten bleibt. Dabei ergibt sich für h=0.0007 noch eine stabile Doppelpeakstruktur, welche

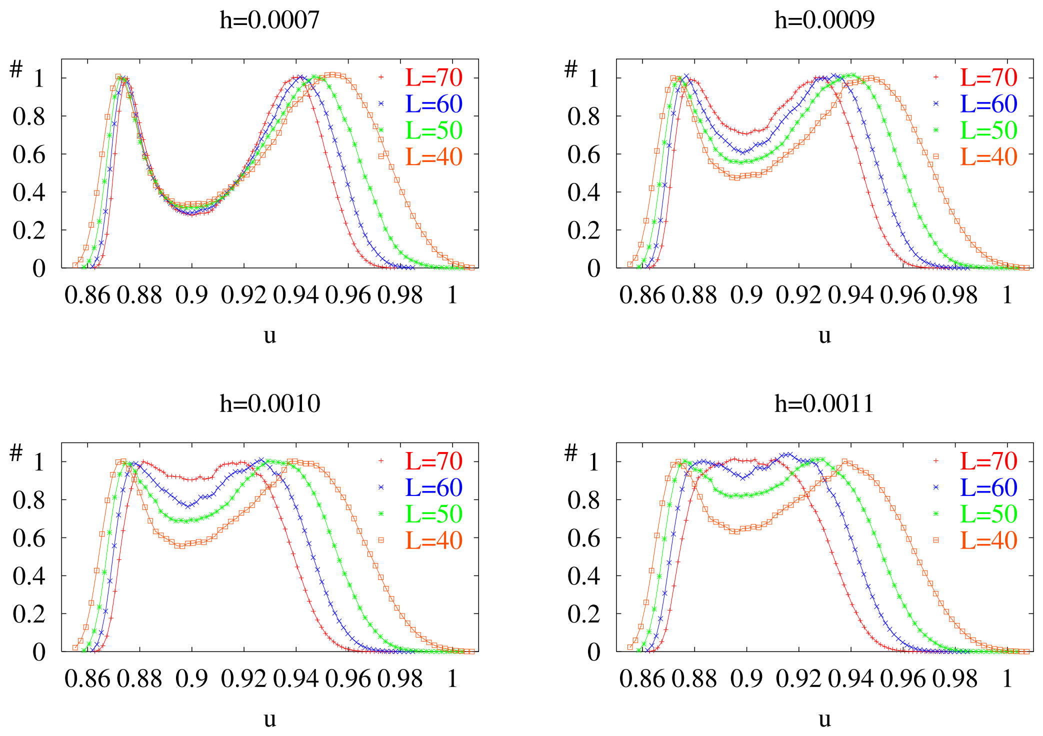


Abbildung 4.4: Verteilung der inneren Energie u bei verschiedenem h

von h=0.0009 bis h=0.0010 für die größten Gitter undeutlicher wird und dann bei h=0.0011 engültig verschwindet. Für das kleinste Gitter liegt dort jedoch noch eine deutlich sichtbare Doppelpeakstruktur vor. Zusätzlich ist bei der Bestimmung der latenten Wärme anhand der Doppelpeakstruktur noch zu beachten, daß ein Histogramm mit einem einzelnen breiten Peak immer noch einen Phasenübergang erster Ordnung kennzeichnen kann, da beide Peaks eine endliche Breite haben und sich diese bei kleiner latenter Wärme fast vollständig Überlappen können. Deswegen muß man eine Extrapolation zum thermodynamischen Limes durchführen, um eine Aussage über die latente Wärme zu treffen. Trägt man die Werte von u bei denen $P(u)$

aus Abb. 4.4 maximal wird gegen $1/L$ auf, so erhält man Abb. 4.5. Dabei wurde als möglicher Fehler von u derjenige Bereich angenommen, bei dem $P(u)$ um weniger als 5% vom Maximalwert abweicht. Dabei sind auf der y-Achse die extrapolierten

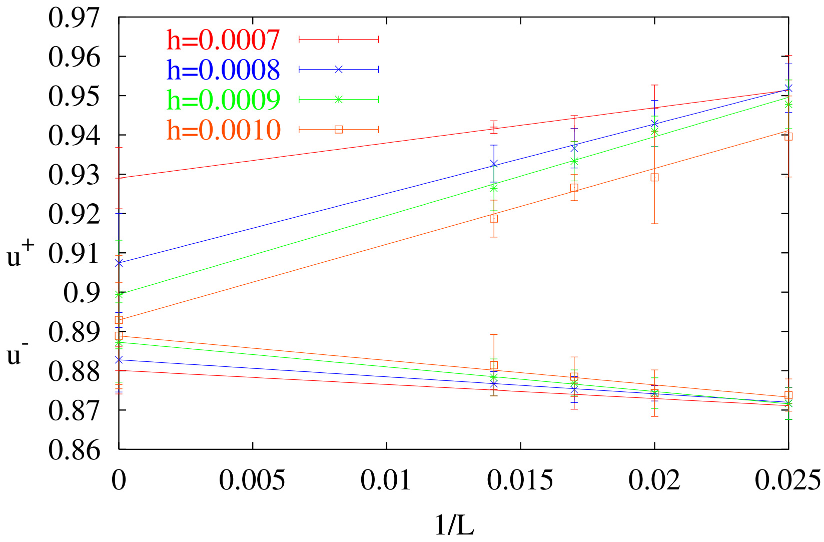


Abbildung 4.5: Positionen der Maxima von P(u) bei verschiedenem h

Werte des thermodynamischen Limes mit Fehlern aufgetragen. Daran erkennt man, daß die latente Wärme schon bei h=0.0008 nur einen sehr kleinen Wert haben kann. Bei h=0.0009 und h=0.0010 kann sie innerhalb der Fehler verschwinden. Deswegen kann man aus diesem Kriterium eine Obergrenze für den kritischen Wert des äußeren Feldes von $h_c < 0.0011$ angeben.

4.2.3 Bestimmung der Basistransformation

Bevor man das in Kapitel 2.4 beschriebene Verfahren anwenden kann, muß man erst den Winkel für die Basistransformation bestimmen. Dies kann, wie schon beschrieben, auf zwei unterschiedliche Weisen geschehen. Die erste Methode mißt den Winkel im Verlauf der Linie des Phasenüberganges erster Ordnung im Kopplungsraum. Abb. 4.6 gibt diesen Verlauf für das größte Gitter mit L=70 an. Dabei wurde der Wert der kritischen Kopplung β_c durch das Maximum der Suszeptibilität bestimmt und in Abhängigkeit des Feldes h aufgetragen. Anschliessend wurde eine Gerade durch diese Punkte gefittet. Der Bereich der Kopplungen h, der zum Fit herangezogen wurde, wurde dabei so gewählt, daß er in der Nähe der vermuteten kritischen Kopplung liegt und dieser Verlauf noch durch eine Gerade angenähert werden kann. Der Arcustangens der Steigung dieser Geraden ist dann der gesucht Winkel α_1. Die Ergebnisse für die unterschiedlichen Volumina sind in der ersten Spalte der Tabelle 4.1 angegeben. Die zweite Methode benutzt die Korrelationsma-

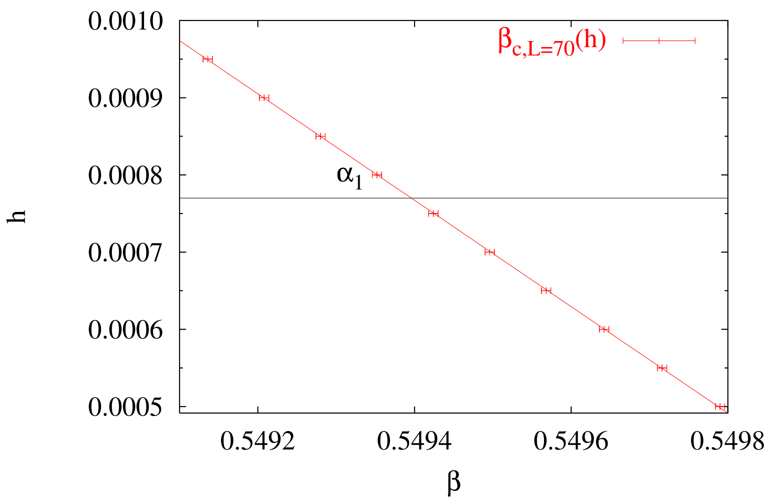


Abbildung 4.6: Verlauf von $\beta_{c,L}(h)$ mit L=70

trix (2.54), um den Winkel α_2 zu bestimmen. Die Ergebnisse für diese Winkel aus den jeweiligen Datensätzen sind im Anhang A aufgelistet, wobei auch hier wieder der Fehler durch eine Jackknife Analyse mit jeweils 10 Blöcken ermittelt wurde. Da diese Werte stark schwanken, wurden nur diejenigen Werte benutzt, die am dichtesten am kritischen Punkt liegen. Dieser muß sich dann selbstkonsistent aus der verschwindenden Observable B_r^3 in (2.57) und dem Schnittpunkt der in (2.58) definierten Binder Kumulanten B_r^4 ergeben. Zusätzlich muß beachtet werden, daß die für die einzelnen Gitter simulierten Werte von β unterschiedlich stark vom kritischen Punkt abweichen. Die in Tabelle 4.1 aufgenommenen Werte sind im Anhang

A besonders hervorgehoben. Da das größte Gitter die kleinsten Abweichungen vom thermodynamischen Limes haben sollte, wird der Winkel durch dieses für nachfolgenden Berechnungen auf 0.604 festgelegt. Dieser Wert stimmt dann innerhalb der Fehler bei beiden Methoden überein. Fehler, die aufgrund der falschen Bestimmung dieses Winkel auftreten könnten, werden nicht berücksichtigt.

L	α_1	α_2
40	0.615(12)	0.608(1)
50	0.607(10)	0.608(1)
60	0.604 (5)	0.609(1)
70	0.603 (4)	0.604(2)

Tabelle 4.1: Werte für den Winkel α in (2.55)

4.2.4 Verschwindende Oberflächenspannung

Eine weitere Observable, die einen Phasenübergang erster Ordnung anzeigt, und somit bei der Extrapolation zum thermodynamischen Limes erhalten bleiben muß ist die Oberflächenspannung. Bei ihr ist die Extrapolationsfunktion durch (2.38) beschrieben. Die Herleitung dieses Zusammenhanges beruhte jedoch auf der Existenz eines Ordnungsparameters. Dieser ist für h≠0 aber nicht bekannt. Da sich die Observable m_n am kritischen Punkt wie ein Ordnungsparameter verhalten soll, wird hier eine Analyse der Histogramme dieser Observablen dargestellt. Damit die Gleichung (2.38) angewendet werden kann, wurden die Verteilungen auf einen Wert von β umgewichtet, bei dem die Peakmaxima gleich hoch sind. Anschließend wurden die Histogramme so normiert, daß die Peakmaxima und die Varianz der Verteilungen eins sind und die Mittelwerte verschwinden. Dann kann man das Peakverhältnis durch die Volumenextrapolation von $\frac{\sigma_L}{T_c} = -\frac{1}{2L^2}\ln(P_{min}(\phi))$ berechnen. Entnimmt man die Minima aus den in Abb. 4.7 dargestellten Histogrammen und trägt sie gegen L^2 auf, so ist $\frac{\sigma}{T_c}$ durch die Steigung gegeben. Fittet man deswegen eine Gerade durch die Punkte und nimmt für das Ablesen des Peakverhältnisses einen Fehler von 5% an, so erhält man die in Tabelle 4.2 aufgeführten Werte der Oberflächenspannung. Daraus erkennt man, daß für h=0.0005 eindeutig eine Oberflächenspannung existiert, die schon bei h=0.0006 deutlich kleiner wird. Bei h=0.0007 ist sie dann nur noch knapp größer als Null und für h=0.00075 verschwindet sie innerhalb der Fehler. Für h=0.0008 hat sie schon einen negativen Wert. Jedoch sind die Annahmen, die zur Herleitung der Volumenabhängigkeit der Oberflächenspannung notwendig waren, nur für einen Phasenübergang erster Ordnung zutreffend, denn in der Nähe der kritischen Kopplung können sich die Peaks der verschiedenen Phasen soweit annähern und dabei so breit werden, daß das Minimum nicht mehr allein durch die gemischte Phase dominiert wird und somit die gemachten Vorraussetzungen nicht mehr gültig sind, d.h. Korrekturen berücksichtigt werden müßen. Setzt man dennoch ihre Gültigkeit voraus, so kann man für den Endpunkt ein Wert von $h_c = 0.00075(5)$ angeben.

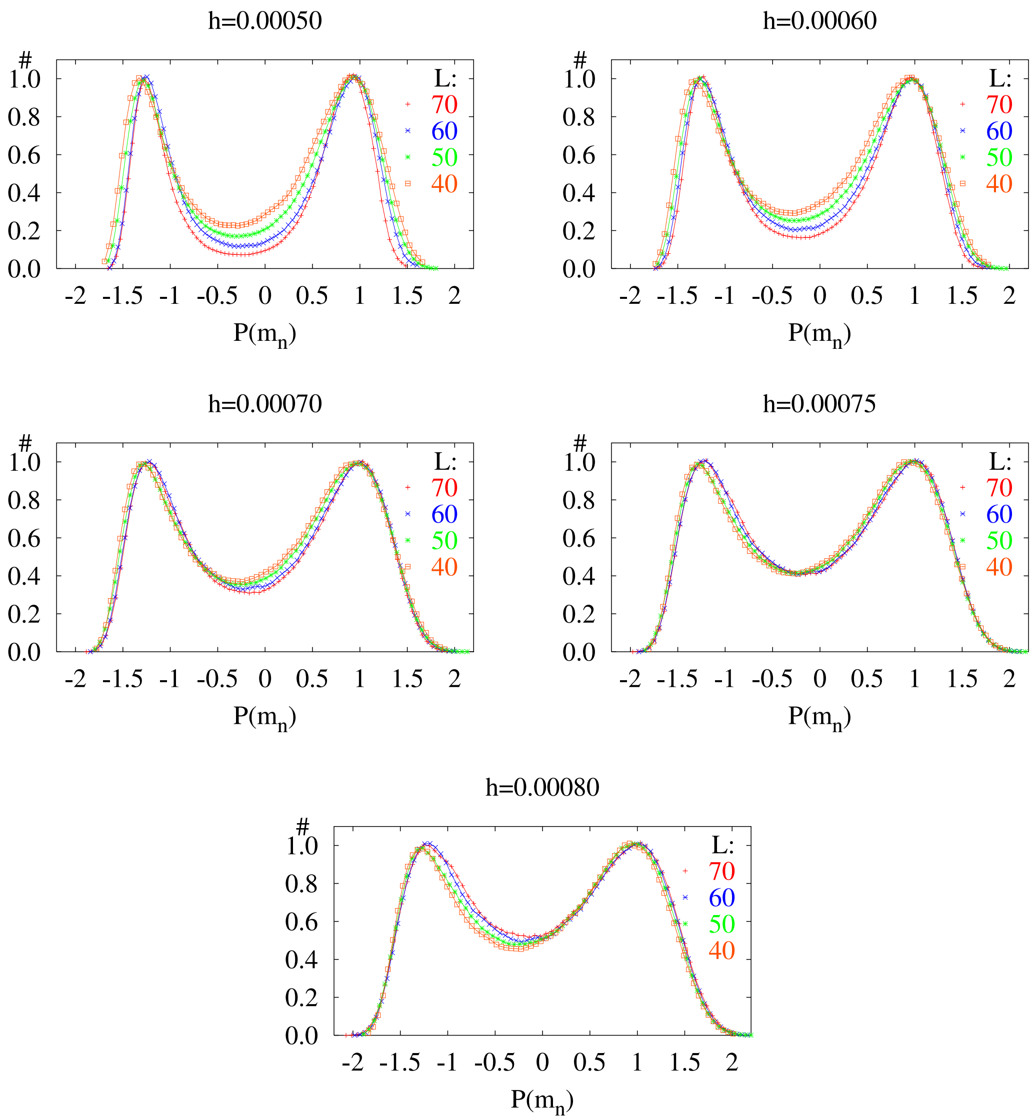


Abbildung 4.7: Verteilung von m_n

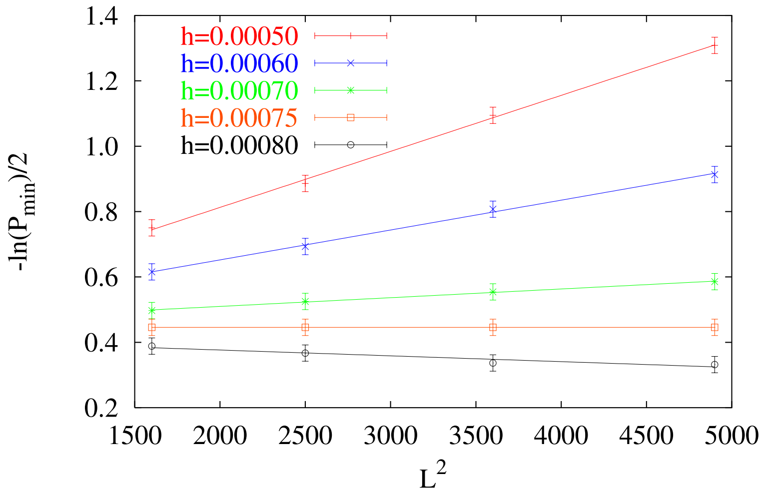


Abbildung 4.8: Bestimmung der Oberflächenspannung

h	$\frac{\sigma}{T_c} * 10^4$	c
0.00050	1.72 (10)	0.47 (3)
0.00060	0.91 (10)	0.47 (3)
0.00070	0.27 (10)	0.46 (3)
0.00075	0.00 (10)	0.45 (3)
0.00080	-0.18 (10)	0.41 (3)

Tabelle 4.2: Fit-Parameter

4.2.5 Schnittpunkt der Binder Kumulante

Die genaueste Bestimmung von h_c erfolgt über die 2. Binder Kumulante, da ein gemeinsamer Schnittpunkt verschiedener Gittergrößen nach Kap. 2.3.2 einen volumenunabhängigen Wert hat. Somit ist für diese Größe keine Extrapolation zum thermodynamischen Limes mehr nötig. Diese Observable zeigt bei festen h für eine Kopplung β ein Minimum, welches für alle Gittergrößen innerhalb der Fehler mit derjenigen Kopplung β identisch ist, bei der auch die Observable B_r^3 verschwindet. In Abb. 4.9 ist daher der minimale Wert von B_r^4 für jede Gittergröße gegen die jeweilige Kopplung des äußeren Feldes aufgetragen. Für die bessere Übersichtlichkeit ist eine Gerade durch diese Punkte gelegt. Man erkennt anhand dieser Abbildung, daß diese Observable bei der Kopplung h=0.00077 für alle Gittergrößen innerhalb der Fehler denselben Wert hat. Dies ist, wie aus Tab. 4.3 ersichtlich, für h=0.00078 oder h=0.0076 nicht mehr für alle Gitter der Fall. Nimmt man noch als mögliche Werte der Kopplung diejenigen Werte von h bei denen sich mehr als zwei Gitter schneiden, so ergibt sich noch der genaueste Wert für die kritische Kopplung am äußerem Feld von $h_c = 0.00077(2)$. Der Wert von $\beta_{c,L}$ liegt bei h=0.00077 bei $\beta_c = 0.54939(2)$.

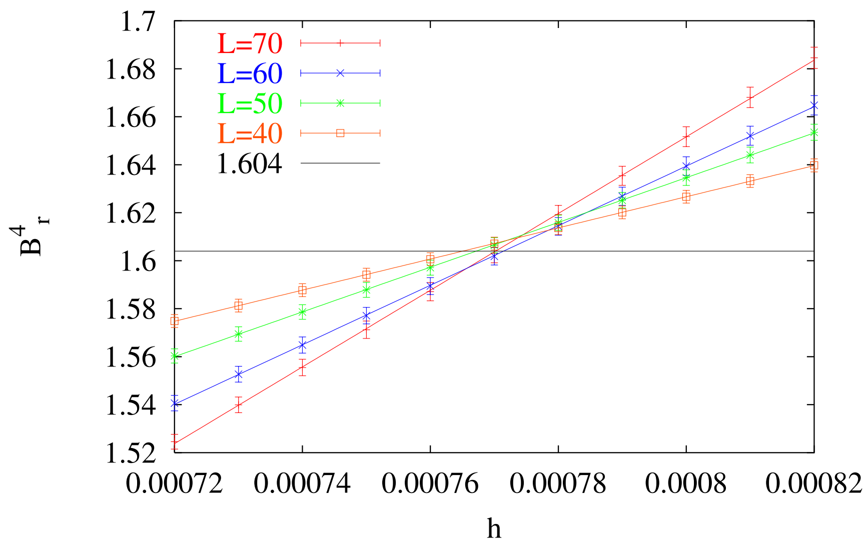


Abbildung 4.9: Schnittpunkte der 2. Binder Kumulante

h	L=40	L=50	L=60	L=70
0.00075	1.594(3)	1.588(3)	1.577(3)	1.571(3)
0.00076	1.601(3)	1.597(3)	1.589(3)	1.587(4)
0.00077	1.607(3)	1.606(3)	1.602(4)	1.603(4)
0.00078	1.614(3)	1.616(4)	1.614(3)	1.619(4)
0.00079	1.620(3)	1.625(4)	1.627(3)	1.635(4)

Tabelle 4.3: Werte der 2. Binder Kumulante

4.3 Bestimmung der Universalitätsklasse

4.3.1 Die Binder-Kumulante

Eine in Kap. 2.3.2 vorgestellte charakteristische Größe für eine Universalitätsklasse ist der Schnittpunkt von B_r^4, der im vorangegangenen Kapitel diskutiert wurde. Dieser ist für die O(4) bzw. die O(2) Universalitätsklasse mit periodischen Randbedingungen 1.092(3) bzw. 1.233(6). Für das 3d Ising-Modell wurde in [20] für diese Observable ein Wert von 1.604(1) berechnet. Der letzte Wert ist in sehr guter Übereinstimmung mit dem in Tab. 4.9 aufgeführten Wert des Schnittpunktes bei h=0.00077 von 1.603(4) für L=70, der innerhalb der Fehler für alle Gitter angenommen wird.

4.3.2 Untersuchung der Skalenvariablen

In Kap. 4.2 wurden die Werte von $h_c = 0.00077(2), \beta_c = 0.54939(2)$ und $\alpha = 0.604$ bestimmt. Nun kann man die neuen temperaturartigen und magnetfeldartigen Richtungen β_r und h_r nach Gleichung (2.56) durch

$$\begin{aligned} \beta_r &= \beta\cos(\alpha) - h\sin(\alpha) \\ h_r &= \beta\sin(\alpha) + h\cos(\alpha) \end{aligned}$$

festlegen. Der mit h_c und β_c gewonnene Wert des kritischen Punktes für diese Skalenvariablen liegt bei

$$h_{r,c} = 0.31265(2), \beta_{r,c} = 0.45175(2).$$

In Abb. 4.10 wird der Verlauf des neuen Ordnungsparameters m_r und die mit ihr definierte Suszeptibilität χ_r entlang dieser magnetfeldartigen Achse bei konstanten $\beta_{r,c}$ dargestellt. Dabei wurde von m_r noch eine Konstante von $m_{r,c} \equiv 1.32$ abgezogen, um einen verschwindenden Ordnungsparameter bei $h_r = h_{r,c}$ zu erhalten.

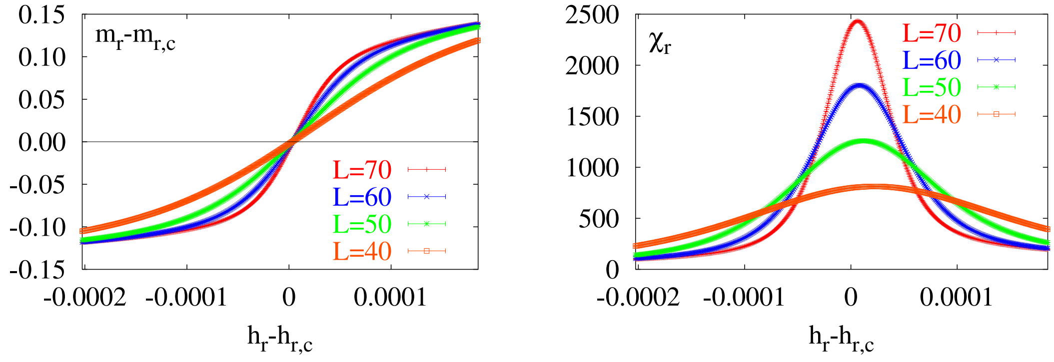


Abbildung 4.10: Verlauf von m_r und χ_r entlang der magnetfeldartigen Richtung bei festen $\beta_r = \beta_{r,c}$

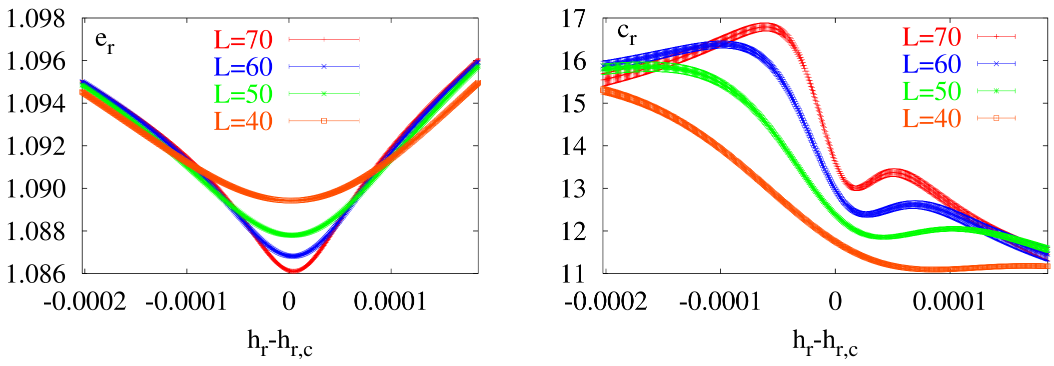


Abbildung 4.11: Verlauf von e_r und χ_r entlang der h_r-Achse bei festen $\beta_r = \beta_{r,c}$

Damit erkennt man einen um $h_{r,c}$ symmetrischen Verlauf dieser Observablen, welches ein weiteres Anzeichen für eine Z(2)-Symmetrie ist. Dieses gilt jedoch auch für andere Symmetrien wie z.B. die O(2)- oder O(4)-Symmetrie, es schließt aber die ursprüngliche Z(3)-Symmetrie aus. Die gleichen Verläufe für die energieartige Variable e_r sind in Abb. 4.11 angegeben. Bei der Energie erkennt man ebenfalls einen relativ symmetrischen Verlauf um $h_{r,c}$. Die spezifische Wärme c_r scheint jedoch diese Symmetrie nicht zu teilen. Jedoch ist der Wert dieser Größe sehr sensibel auf die Bestimmung des kritischen Punktes und insbesondere auf die des Winkels α. Deswegen ist mit der in dieser Arbeit erreichten Genauigkeit ein symmetrischer Verlauf weiterhin möglich, da die Sensibilität auf diese Größen nicht mit in die Fehlerbestimmung einfließt. Einen weiteren Hinweis hierauf liefert auch der Erwartungswert des Quadrates der "Energie", der ebenfalls symmetrisch ist. Das Erscheinen des Dips bei $h_{r,c}$ bleibt dennoch unverstanden. Aufgrund dieser Probleme wurde hier auf die Skalenanalyse der spezifischen Wärme verzichtet. Betrachtet man die obigen Bilder

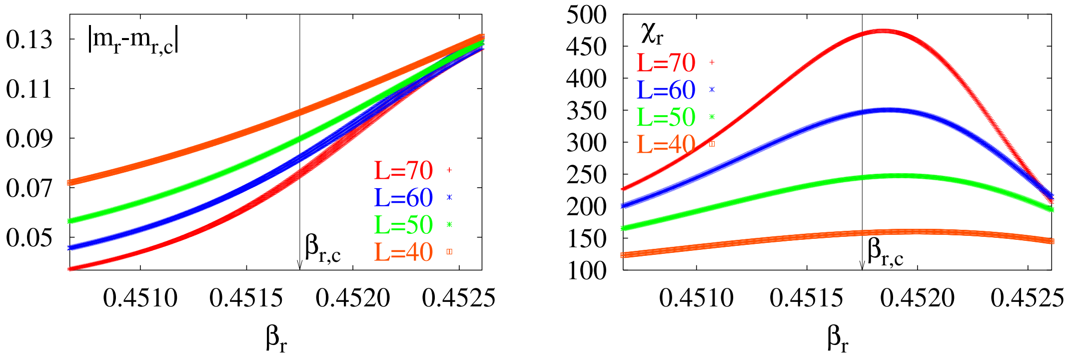


Abbildung 4.12: Verlauf von m_r und χ_r entlang der temperaturartigen Richtung bei festen $h_r = h_{r,c}$

noch genauer, so deuten diese auf einen leicht größeren Wert von $h_{c,r}$ hin. Jedoch ist der angegebene Fehler auf diesem Wert größer als diese kleine Abweichung.

In derselben Weise kann man auch eine Untersuchung der temperaturartigen Richtung durchführen. Dabei erwartet man, daß der Ordnungsparameter m_r unterhalb von $\beta_{r,c}$ verschwindet und dessen Suszeptibilität χ_r dort ein Maximum aufweist. Dabei muß aber beachtet werden, daß endliche Systeme immer zwischen den verschiedenen geordneten Zuständen springen können. Um den Einfluß dieses Effektes zu verringern, verwendet man bei der Berechnung der Observablen nur den Betrag des Ordnungsparameters. Das damit erzielte Verhalten in Abb. 4.12 stimmt mit den Erwartungen überein. Nachdem man sich von der Richtigkeit der Skalenvariablen überzeugt hat, kann man mit Hilfe der“Finite Size Scaling”-Relationen aus Kap. 2.3.2 die kritischen Exponenten bestimmen. Dafür trägt man das Maximum der Suszebtibilität bei festgehaltenem $h_{r,c}$ gegen die Gittergröße auf. Diese muß dann mit $\chi_r \propto L^{\gamma/\nu}$ skalieren. Der Exponent für den in Abb. 4.13 dargestellten Verlauf wurde mit Hilfe eines doppellogarithmischen Fits auf $\gamma/\nu = 1.93(1)$ bestimmt. Mit Hilfe des Maximums von χ_r kann noch eine pseudokritische Kopplung $\beta_{r,cL}$ definiert werden. Damit läßt sich dann über $|\beta_{r,c} - \beta_{r,cL}| \propto L^{-1/\nu}$ der kritische Exponent $1/\nu$ bestimmen. Hält man an dem bestimmten kritischen Wert von $\beta_{r,c}$ fest und fittet das vorhergesagte Skalenverhalten, so erhält man einen Wert von $1/\nu = 1.55(3)$. Einen weiteren kritischen Exponenten bekommt man, indem Gl. (2.49) benutzt wird. Danach verschwindet der Ordnungsparameter mit $\langle |m_r - m_{r,c}| \rangle \propto L^{-\beta/\nu}$ am kritischen Punkt. Wieder erhält man dann mit Hilfe eines doppellogarithmischen Fits den in Abb. 4.13 dargestellten Verlauf mit einem Exponenten von $\beta/\nu = 0.506(4)$.

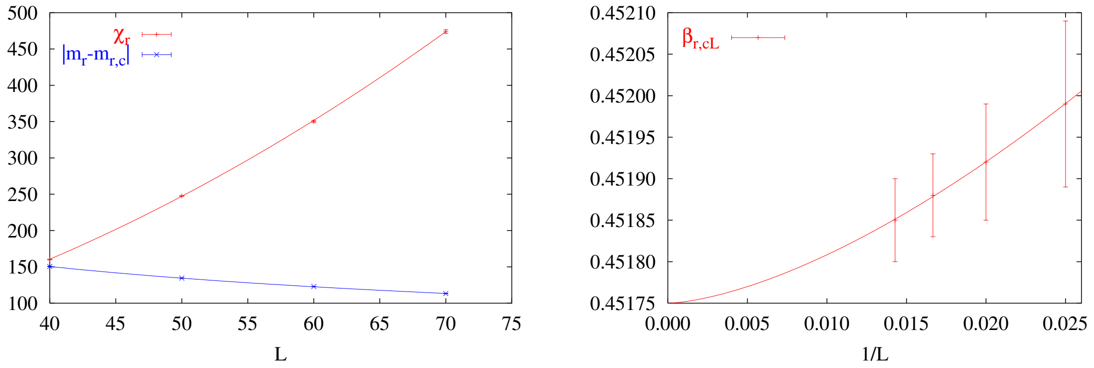


Abbildung 4.13: Abhängigkeit der Observablen χ_r, $\langle|m_r - m_{r,c}|\rangle_{\beta_r=0.45175}$ (links) und $\beta_{r,cL}$ (rechts) von der Systemgröße. Der Betrag des Ordnungsparameters ist in dieser Darstellung mit einem festen Faktor multipliziert worden.

Vergleicht man die bestimmten Exponenten mit denen in Tab. 4.4 aufgeführten, so sind β/ν und γ/ν jeweils leicht kleiner. Jedoch unterscheiden sich diese Exponenten der angegebenen Universalitätsklassen innerhalb der Genauigkeit nicht. Nur der Exponent $1/\nu$ unterscheidet sie signifikant und der gefundene Wert liegt am nächsten bei dem Wert des 3d Ising-Modells. Somit ist die gefundene Übereinstimmung mit dem Ising-Modell am größten.

Da für die Energie und deren spezifische Wärme in dieser temperaturartigen Richtung die gleichen Probleme wie in der magnetfeldartigen Richtung entstehen, wird hier auf ihre Analyse vollständig verzichtet.

	3d Ising	O(2)	O(4)
$1/\nu$	1.59	1.49	1.33
β/ν	0.52	0.52	0.52
γ/ν	1.96	1.96	1.96

Tabelle 4.4: Bekannte kritische Exponenten für unterschiedliche Universatlitätsklassen nach [2]

4.3.3 Doppelhistogramm

Einen weiteren Hinweis auf die Universalitätsklasse liefert ein Vergleich der Histogramme von e_n und m_n, der bei den Doppelhistogrammen aber nur qualitativ sein kann. Dafür sind in Abb. 4.14 die Histogramme mit der Gittergröße L=50, einmal für das Potts-Modell bei h=0.00077 und das 3d Ising-Modell nebeneinander gestellt. Dabei wurde bei dem Histogramm für das Potts-Modell zu einer Kopplung β umgewichtet, bei der dieses Histogramm möglichst symmetrisch ist. Bei dem Ising-Modell wurde der bekannte kritische Punkt gewählt. Außerdem mußte bei der Energie und der Magnetisierung kein Basiswechsel vollzogen werden. Beide Histogramme wurden jedoch zusätzlich wieder so normiert, daß die Varianzen jeweils in e- und m-Richtung eins sind, und der Mittelwert verschwindet. Außerdem sind noch die Volumina unter dieser Verteilung auf eins normiert. Damit wird nach Kap. 2.4 erst eine Vergleichbarkeit der Historgramme ermöglicht. Zum Schluß wurden die Höhen über alle angrenzenden Bins gemittelt, um statistische Schwankungen auszugleichen.

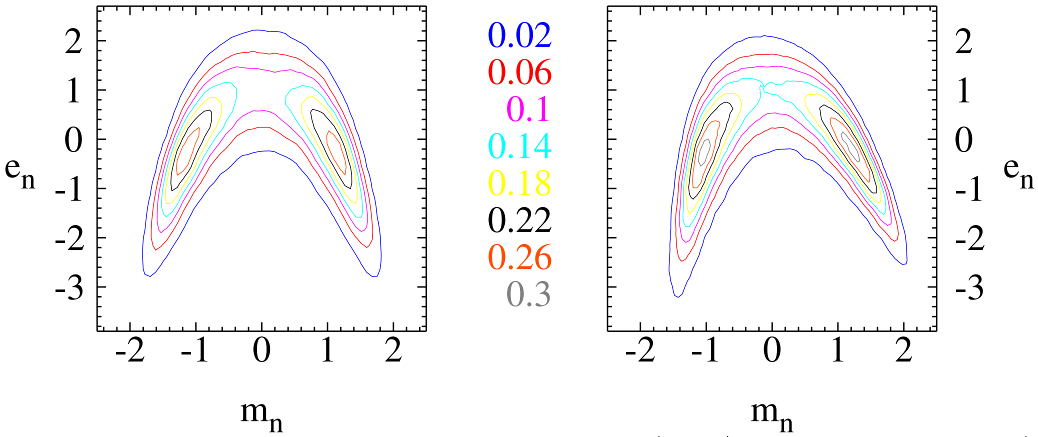


Abbildung 4.14: Histogramm des Ising-Modells (links) und Potts-Modells (rechts) am kritischen Punkt mit L=50. In der Mitte sind die Werte der Höhenlinien angegeben.

Die so erhaltene Verteilung vom Potts-Modell ist der des Ising-Modells sehr ähnlich. Sie ist nur ein wenig höher und asymmetrisch. Beides wird jedoch bei größeren Gittern weniger, wie man dem vergleichbaren Histogramm in Abb. 4.15 für das größere Gitter mit L=70 entnehmen kann. Auch für dieses wurde wieder zu einer Kopplung β umgewichtet, bei der das Histogramm am symmetrischsten ist. Vergleichbare Histogramme anderer Universalitätsklassen sind aus [2] entnommen und im Anhang aufgeführt.

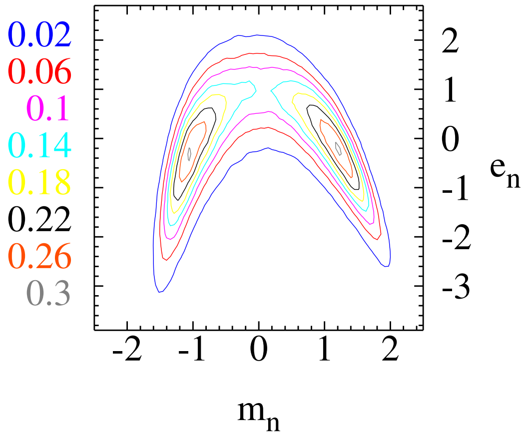


Abbildung 4.15: Histogramm des Potts-Modells mit L=70

4.3.4 Histogramm des Ordnungsparameters

Die Untersuchung der Einzelhistogramme des Ordnungsparameters P(m) kann auch quantitativ geschehen, da dieses nach [20] durch

$$P(m) \propto \exp\left\{-\left(\frac{m^2}{m_0^2}-1\right)^2\left(a\frac{m^2}{m_0^2}+c\right)\right\} \tag{4.2}$$

sehr genau parametrisiert werden kann. Dabei sind a=0.158(2) und c=0.776(2) für die Ising-Universalitätsklasse charakteristische Konstanten. Die hier gewonnenen Histogramme sind allerdings noch ein wenig asymmetrisch. Deswegen wird an sie die etwas allgemeinere Funktion

$$P(m) \propto \exp\left\{-(x^2-1)^2(ax^2+bx+c)+hx\right\} \qquad x=\frac{m-m_1}{m_0} \tag{4.3}$$

gefittet. Die Parameter m_0 und m_1 sind dabei für die Reskalierung und für das Verschieben der Verteilung im Ganzen verantwortlich. Die beiden Parameter b und h sorgen für die schon angesprochenen Asymmetrie der Verteilung. Sie kompensieren eventuelle Abweichungen vom kritischen Punkt des thermodynamischen Limes. Diese Einflüße, und die damit verbundenen Parameter, sollten jedoch für große Gitter verschwinden. Die beiden verbleibenden Parameter a,c sollten dann gegen die Ising-Werte streben. Gewichtet man die Histogramme $P(m_n)$ zu einem β-Wert, an dem die Peakhöhen gleich sind, und normiert deren Fläche auf eins, so kann man an sie die Verteilung (4.3) fitten. Dabei sind diese β-Werte nicht diejenigen, bei denen schon das Doppelhistogramm am symmetrischten war. Dies kann man aber nach orthogonalen Transformationen wie einer Drehung auch nicht erwarten, jedoch werden die Unterschiede bei größeren Gittern kleiner. In Abb. 4.16 sind die so erhaltenen Werte für die $P(m_n)$ Histogramme bei h=0.00077 gegen die Gittergröße aufgetragen. Für den thermodynamischen Limes sind darin die Ising-Werte dieser Parameter eingezeichnet. Eine Extrapolation dieser Werte zum unendlichen Volumen ist nicht möglich, da diese Parameter keine konsistente Skalierung aufweisen. Ähnliche Probleme traten jedoch auch in [2] auf. Deswegen wird hier auf eine Extrapolation zum thermodynamischen Limes verzichtet. Man erkennt aber dennoch, daß diese Parameter sich mit größerem Volumen den Werten des Ising-Modells annähern.

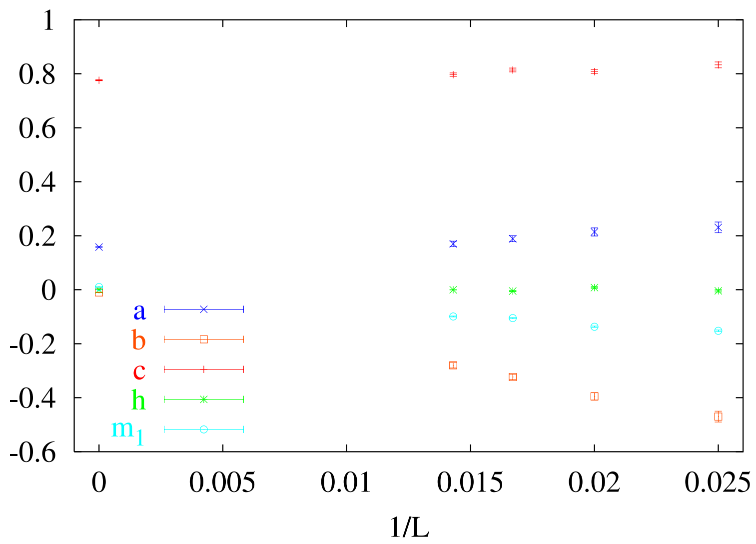


Abbildung 4.16: Parameter des P(m_n) Histogrammes

Eine weitere, daraus ableitbare charakteristische Größe für die Universalitätsklasse, ist wieder das Verhältnis von Peakmaximum zu seinem Peakminimum. Dieses ist sollte für alle Histogramme ein konstanter Wert sein. Die mit den hier betrachteten $P(m_n)$ Histogrammen gefundenen Verhältnisse sind in Tabelle 4.5 angegeben. Der Fehler für diese wurde wie in Kap. 4.2.4 mit 5% abgschätzt. Man erkennt, daß die Verhältnisse systematisch größer als die des Ising-Modells von $P_{max}/P_{min} = 2.173(4)$ sind, jedoch nähern sie sich mit größerem Volumen diesem Wert an. Für die beiden größten Gitter stimmen sie dann innerhalb der Fehler mit denen des Ising-Modells überein.

L	70	60	50	40
P_{max}	0.438	0.441	0.442	0.444
P_{min}	0.196	0.193	0.194	0.192
P_{max}/P_{min}	2.23(11)	2.28(11)	2.29(11)	2.31(11)

Tabelle 4.5: Peakverhältnisse bei verschiedenen Gittergrößen

Zusammenfassung

In dieser Arbeit wurde mit Hilfe verschiedener Kriterien der kritische Endpunkt einer Phasenübergangslinie erster Ordnung lokalisiert, und seine Universalitätsklasse festgestellt. Dieses wurde anhand des dreidimensionalen Z(3) Potts-Modells wegen seiner Verbindung zur QCD mit schweren Quark-Massen durchgeführt. Für die Bestimmung dieses Endpunktes ist in der Vergangenheit schon eine numerische Untersuchung und eine Mean-Field Analyse von DeGrand und DeTar in [6] durchgeführt worden. Bei der Mean-Field Analyse ergab sich für das hier betrachtete Modell ein Wert von $h_c^{MF} = \ln 2 - \frac{2}{3} \approx 0.0264$, der nicht mit dem numerisch ermittelten Bereich von $0.0015 < h_c < 0.015$ übereinstimmt. Für h=0 hat sich desweiteren herausgestellt, daß für Skalenaussagen die Gitter größer als die in [6] untersuchten sein müssen [19]. Diese Arbeit hat darüber hinaus ergeben, daß man für die Doppelpeakstruktur eines Histogrammes eine Extrapolation zum thermodynamischen Limes durchführen muß, um aus diesem Kriterium eine Aussage für die Ordnung des Phasenüberganges zu machen. Diese Erkenntnisse stellen die Aussagen von DeGrand und DeTar in Frage.

Die Extrapolation der Doppelpeakstruktur zu unendlichem Volumen wurde hier anhand der Position der Peakmaxima des Histogrammes der inneren Energie durchgeführt. Die Volumenabhängigkeit dieser Größe wurde als linear angenommen. Dabei ist aber nicht auszuschließen, daß die Finite Size Effekte einen anderen Zusammenhang mit der Gittergröße ergeben, so daß hieraus nur eine obere Grenze für den kritischen Endpunktes von $h_c < 0.0011$ gewonnen werden kann.

Desweiteren wurde die Volumenabhägigkeit des Maximum der Suszeptibilität und spezifischen Wärme analysiert. Dabei stellte sich heraus, daß dieses keine exakte Bestimmung des Endpunktes ermöglicht, da a priori nicht bekannt ist, welche Gittergrößen zur Beobachtung der erwarteten Skalierungen im Crossover-Bereich oder im Bereich erster Ordnung notwendig sind. Zusätzlich verhalten sich die spezifische Wärme und die Suszeptibilität nahezu gleich. So ergibt eine Finite-Size Skalenanalyse einen kritischen Exponenten von $\gamma/\nu = 1.956(7)$ und einen sehr großen Wert von α/ν=1.827(7). Dies ist ein Indiz dafür, daß die temperaturartige und magnetfeldartige Richtung nicht richtig identifiziert wurden und die aus ihnen abgeleiteten Observablen Energie und Magnetisierung miteinander vermischt sind.

Die aufgezeigten Probleme werden durch eine Transformation der Observablen von e und m in eine Basis, in der diese unkorreliert sind, gelöst. So hat man durch das bekannte Skalenverhalten der Oberflächenspannung eine Aussage über die zu erwartenden Finite Size Effekte. Jedoch leidet diese Schätzung für den Endpunkt an dem Problem, daß die für die Finite Size Effekte gemachten Annahmen nicht mehr in der Nähe der kritischen Kopplung gültig sind, da der Phasenübergang schwach erster Ordnung wird und Korrekturen zum finite-size Skalenverhalten beitragen. Setzt man dennoch ihre Gültigkeit vorraus, so ergibt sich damit ein genauerer und etwas kleinerer Wert für den kritischen Endpunkt von $h_c = 0.00075(5)$.

Der Schnittpunkt der durch die transformierten Observablen berechnete Binder-Kumulante B_r^4 liefert die genaueste Bestimmung des Endpunktes. Mit diesen Kriterien ist es dann möglich, diesen mit einem Fehler von 3% auf

$$h_c = 0.00077(2), \beta_c = 0.54939(1)$$

zu bestimmen. Dies stimmt mit dem durch die Oberflächenspannung gefundenen Wert überein und liegt wie dieser leicht unterhalb des durch die latente Wärme gewonnenen Wertes.

Mit den nach der Basistransformation erhaltenen Observablen konnte auch eine Analyse der Universalitätsklasse durchgeführt werden. Die erste universelle Größe erhält man durch den Schnittpunkt der Binder-Kumulante, bei dem für die Ising-Universalitätsklasse bestimmten Wert von 1.604(1). Das eher übliche Kriterium zur Bestimmung der Universalitätsklasse bilden jedoch die kritischen Exponenten. Diese werden hier durch die Finite Size Scaling Relationen bestimmt. Deren Analyse mußte sich jedoch auf den Ordnungsparameter und seine Suszeptibilität beschränken. So wurden die kritischen Exponenten $\gamma/\nu = 1.93(1), \beta/\nu = 0.506(4)$ und $1/\nu = 1.55(3)$ bestimmt, die mit denen des Ising-Modells verträglich sind.

Ein Vergleich der kombinierten Histogramme der energieartigen und magnetisierungsartigen Observablen liefert einen weiteren Hinweis auf die Universalitätsklasse des Ising-Modells, und schließt wieder z. B. die O(2)- oder O(4)-Universalitätsklassen aus. Dieser Vergleich hat jedoch den Nachteil nicht quantifizierbar zu sein. Deswegen kann eine Aussage durch den Vergleich bei schlechteren Daten schwierig werden. Dieser Mangel wird jedoch bei dem Einzelhistogramm der magnetisierungsartigen Observable durch die Kenntniss einer Parametrisierung des Histogrammes behoben. Auch dieser Vergleich liefert einen Hinweis auf die Ising-Universalitätsklasse.

Abschliessend kann man sagen, daß sich der Endpunkt der Linie des Phasenübergangs erster Ordnung vom Potts-Modell in der Ising-Universalitätsklasse befindet.

Wenn man annimmt, daß die Universalitätseigenschaften durch den in Kap. 1 beschriebenen Grenzübergang innerhalb der QCD zu diesem Modell unberührt bleiben, so ist auch der Endpunkt des Deconfinement-Überganges bei schweren Quarkmassen in der gleichen Universalitätsklasse. Theoretische Überlegungen in [21] über diesen Endpunkt stützen diese Annahme.

Anhang A

Simulationsparameter

In den Tabellen für die einzelnen Gittergrößen stehen in den ersten beiden Spalten die Werte der simulierten Kopplungspaare β, h. Danach ist die Anzahl der Iterationen und die mit Hilfe der Energie pro Link e bestimmten Autokorrelationszeit τ angegeben. In der letzten Spalte steht der Wert des durch die in Gl. (2.54) definierten Korrelationsmatrix bestimmten Winkels α.

A.1 Gittergröße L=70

h	β	Iterationen	τ	α
0.00050	0.5497950	9500	97	0.597 (2)
0.00050	0.5497900	9500	113	0.595 (3)
0.00050	0.5497850	9500	120	0.591 (3)
0.00060	0.5496500	9500	71	0.606 (2)
0.00060	0.5496300	14500	61	0.592 (2)
0.00060	0.5496000	9500	40	0.569 (2)
0.00070	0.5495000	4500	29	0.605 (3)
0.00070	0.5494950	9500	31	0.604 (1)
0.00070	0.5494925	9500	29	0.599 (2)
0.00070	0.5494900	9500	25	0.601 (2)
0.00075	0.5494250	4500	42	0.604 (3)
0.00075	0.5494225	9500	31	0.605 (3)
0.00075	0.5494210	4827	26	0.601 (3)
0.00075	0.5494200	9500	28	0.601 (2)
0.00077	0.5493900	13244	24	**0.604 (2)**
0.00077	0.5493950	3849	23	0.609 (4)
0.00080	0.5493500	8921	22	0.605 (2)
0.00080	0.5493490	19500	19	0.607 (1)
0.00080	0.54934505	9500	20	0.603 (2)
0.00080	0.5493000	4500	15	0.566 (5)
0.00085	0.5493000	4500	14	0.634 (3)
0.00085	0.5492800	19500	20	0.610 (2)
0.00085	0.5492500	4500	19	0.587 (4)
0.00090	0.5492100	4500	15	0.616 (2)
0.00090	0.5492000	12395	15	0.604 (3)
0.00010	0.5490500	4285	11	0.605 (1)

A.2 Gittergröße L=60

h	β	Iterationen	τ	α
0.00050	0.5498000	4500	60	0.600 (3)
0.00050	0.5497000	4500	23	0.545 (10)
0.00060	0.5496500	9500	47	0.606 (3)
0.00060	0.5496400	19500	36	0.599 (1)
0.00060	0.5496300	9500	27	0.593 (1)
0.00070	0.5495200	4500	20	0.615 (2)
0.00070	0.5495000	4500	22	0.604 (3)
0.00070	0.5494950	9500	21	0.609 (1)
0.00070	0.5494900	4083	25	0.598 (4)
0.00075	0.5494250	9500	18	0.607 (1)
0.00075	0.5494225	9500	18	0.604 (2)
0.00075	0.5494210	19500	16	0.606 (1)
0.00075	0.5494200	9500	21	0.601 (2)
0.00077	0.5493950	18320	17	**0.609 (2)**
0.00080	0.5494000	4500	12	0.641 (3)
0.00080	0.5493510	9500	21	0.603 (2)
0.00080	0.5493500	4500	16	0.606 (2)
0.00080	0.5493490	19500	15	0.605 (2)
0.00080	0.5493000	4500	13	0.577 (3)
0.00085	0.5492860	19204	13	0.612 (1)
0.00090	0.5492200	4312	11	0.616 (2)
0.00090	0.5492000	4500	13	0.609 (4)
0.00100	0.5490900	2578	7	0.636 (4)
0.00100	0.5490000	4500	16	0.579 (5)
0.00110	0.5489500	4121	8	0.601 (3)
0.00110	0.5490000	4500	8	0.636 (3)
0.00150	0.5484000	4500	5	0.681 (2)
0.00150	0.5483000	3678	4	0.641 (3)
0.00200	0.5478000	4500	3	0.676 (2)

A.3 Gittergröße L=50

h	β	Iterationen	τ	α
0.00050	0.549800	4500	24	0.602 (3)
0.00050	0.549700	4500	22	0.556 (8)
0.00060	0.549650	9500	26	0.602 (14)
0.00060	0.549630	9500	17	0.593 (2)
0.00060	0.549600	9500	17	0.582 (3)
0.00070	0.549520	4500	15	0.614 (3)
0.00070	0.549510	9500	13	0.610 (1)
0.00070	0.549500	9500	12	0.604 (1)
0.00075	0.549450	4500	12	0.619 (2)
0.00075	0.549427	9489	12	0.609 (2)
0.00075	0.549420	19500	12	0.605 (1)
0.00075	0.549400	4500	12	0.594 (2)
0.00077	0.549395	19250	12	**0.608 (1)**
0.00080	0.549350	19500	11	0.608 (1)
0.00080	0.549348	9500	11	0.607 (2)
0.00085	0.549280	19257	11	0.610 (1)
0.00090	0.549300	4500	9	0.653 (3)
0.00090	0.549200	4500	9	0.609 (3)
0.00100	0.549100	4500	8	0.626 (3)
0.00100	0.549000	4500	8	0.586 (3)
0.00100	0.548900	4500	7	0.543 (3)
0.00110	0.549000	4500	6	0.657 (2)
0.00110	0.548900	4500	7	0.611 (2)
0.00150	0.548500	4500	4	0.681 (2)
0.00150	0.548400	4500	4	0.640 (2)
0.00150	0.548300	4500	4	0.608 (2)
0.00170	0.548300	4500	4	0.700 (3)
0.00170	0.548200	4500	4	0.673 (3)
0.00170	0.548100	4500	4	0.636 (3)
0.00200	0.547800	4500	3	0.673 (1)

A.4 Gittergröße L=40

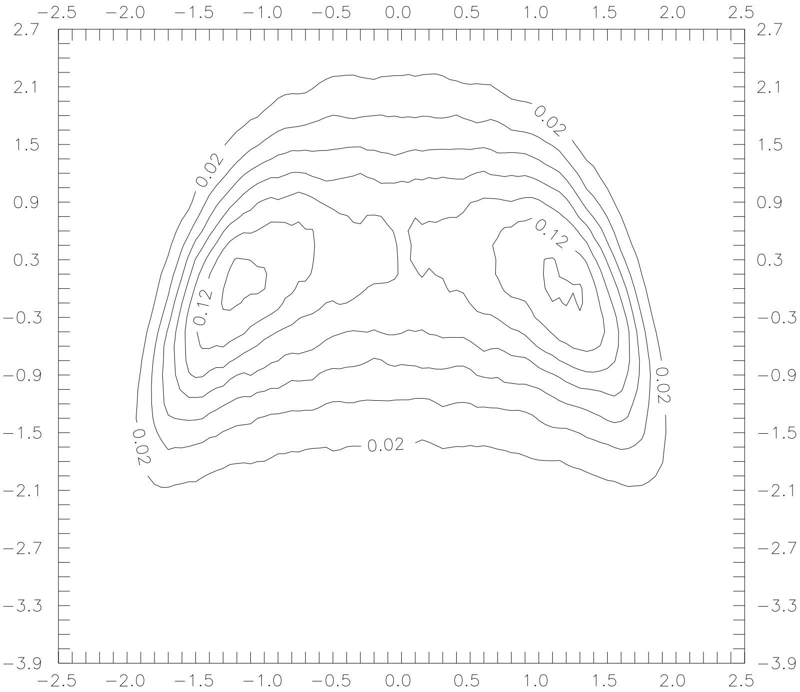
h	β	Iterationen	τ	α
0.00050	0.549900	4500	11	0.625 (2)
0.00050	0.549800	4500	15	0.601 (3)
0.00050	0.549700	4500	9	0.572 (3)
0.00050	0.549600	4500	7	0.537 (6)
0.00060	0.549700	9500	11	0.616 (2)
0.00060	0.549660	14499	11	0.606 (1)
0.00060	0.549640	14500	9	0.599 (2)
0.00070	0.549550	4500	9	0.617 (2)
0.00070	0.549520	4500	8	0.611 (2)
0.00070	0.549510	14500	9	0.609 (1)
0.00070	0.549500	6500	8	0.603 (1)
0.00070	0.549400	9500	8	0.577 (2)
0.00077	0.549395	26295	7	**0.608 (1)**
0.00080	0.549370	19478	8	0.614 (1)
0.00080	0.549349	19500	8	0.610 (1)
0.00085	0.549400	4500	6	0.647 (3)
0.00085	0.549300	4500	7	0.613 (2)
0.00085	0.549290	9500	8	0.612 (2)
0.00090	0.549300	3356	6	0.645 (2)
0.00090	0.549200	4500	7	0.613 (2)
0.00100	0.549200	4500	6	0.652 (3)
0.00100	0.549100	4500	6	0.624 (2)
0.00100	0.549000	4500	5	0.595 (3)
0.00100	0.548900	4299	5	0.565 (5)
0.00110	0.549000	4500	5	0.636 (2)
0.00110	0.548900	4500	6	0.610 (2)
0.00150	0.548500	4500	4	0.668 (3)
0.00150	0.548400	4500	4	0.640 (3)
0.00150	0.548300	4500	4	0.612 (3)
0.00170	0.548400	4342	3	0.717 (2)
0.00170	0.548300	4500	4	0.685 (3)
0.00170	0.548200	4500	3	0.665 (3)
0.00170	0.548100	4500	4	0.637 (2)
0.00200	0.547900	4500	3	0.691 (2)
0.00200	0.547800	4500	3	0.670 (1)

A.5 Gittergröße L=30

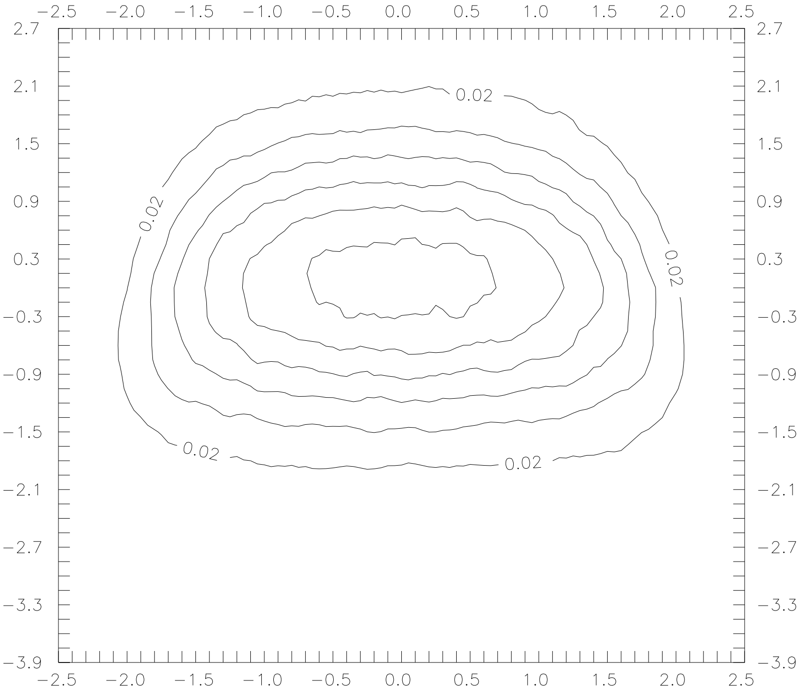
h	β	Iterationen	τ	α
0.00150	0.548600	4500	3	0.602 (2)
0.00150	0.548500	4500	3	0.619 (2)
0.00150	0.548400	4500	3	0.654 (3)
0.00150	0.548200	4500	3	0.671 (3)
0.00200	0.548100	4500	3	0.717 (3)
0.00200	0.547900	4500	3	0.678 (2)
0.00200	0.547800	4500	3	0.661 (2)

Anhang B

Verteilungen anderer Universalitätsklassen



Verteilung von e_n und m_n des O(2)-Modells



Verteilung von e_n und m_n des O(4)-Modells

Literaturverzeichnis

[1] Z. Fodor, *Electroweak Phase Transitions* hep-lat/9909162

[2] R. Rummukainen, et. al. *The Universality Class of the Electroweak Theory*, Nucl. Phys. B **532**(1998) 283.

[3] A. Sopczak, *Higgs Boson Searches at LEP Up to $\sqrt{s}$ = 202 GeV* hep-ph/0004015

[4] N.B. Wilding, *Simulation studies of fluid critical behaviour*, J. Phys.: Condens. Matter **9** (1997) 585.

[5] F.Y. Wu, *The Potts model*, Rev. Mod. Phys. **54** (1982) 235.

[6] T.A. DeGrand, C.E. DeTar, *Phase structure of OCD at high Temperatutre with massive Quarks and finite Quark density: a Z(3) paradigm*, Nucl. Phys. B **225** (1983) 590.

[7] M. Fukugita, et. al. *Finite-Size Scaling Study of the Deconfining phase transition in pure SU(3) Lattice Gauge Theory*, Nucl. Phys. B **337** (1990) 181.

[8] O.F. de Alcantara Bonfim, *Finite-Size Effects and Phase Transition in the Three-Dimensional Three-State Potts Model*, J. Stat. Phys. **59** (1990) 1397.

[9] M. Fukugita, et. al. *Finit-Size Scaling of the Three-State Potts Model on a Simple Cubic Lattice*, J. Stat. Phys. **62** (1991) 105.

[10] J. Cardy, *Scaling and Renormalization in Statistical Physics*, Cambridge Lecture Notes in Physics **5**(1996).

[11] K. Binder, *Monte Carlo calculation of the surface tension for two- and three-dimensional lattice-gas models*, Phys. Rev. A. **25** (1982) 1699.

[12] K. Binder, *Finite-size effects at temperature-driven first-order transition*, Phys. Rev. B. **34** (1986) 1841.

[13] M.E. Fisher, A.N. Berker, *Scaling of first-order phase transitions in thermodynamic and finite systems*, Phys. Rev. B. **26** (1982) 2507.

[14] K. Binder, *Finite Size Scaling Analysis of Ising Model Block Distribution Functions*, Z. Phys. B. **43** (1981) 119.

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

[16] R.H. Swendsen, J.-S. Wang *Nonuniversal Critical Dynamics in Monte Carlo Simulations*, Phys. Rev. Lett. **58** (1987) 86.

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

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

[19] W. Janke, R. Villanova *Three-dimensional 3-state Potts model revisited with new techniques*, Nucl. Phys. B **489** (1997) 679.

[20] M.M. Tsypin, H.W. Blöte, *Probability distribution of the order parameter for the 3D Ising model universality class : a high precision Monte Carlo study*, cond-mat/9909343

[21] S. Gavin,A. Gocksch, R.D. Pisarski *QCD and the chiral critical point*, Phys. Rev. D. **49** (1994) 3079.

Danksagung

Hiermit möchte ich mich bei allen bedanken, die mir bei der Anfertigung dieser Diplomarbeit geholfen haben. Dies gilt insbesondere Herrn Prof. Dr. Frithjof Karsch für seine hervorragende Betreuung. Desweiteren bei Andreas Peikert für seine Anregungen und die vielen Diskussionen die wir zusammen geführt haben. Bedanken möchte ich mich auch bei Ines Wetzorke, für die schnelle Hilfe in allen technischen Fragen und allen anderen Mitgliedern in der Arbeitsgruppe.

Ein besonder Dank gilt noch meinen Eltern, die mich während des gesammten Studiums immer unterstützt haben.

Hiermit erkläre ich, daß ich außer den im Literaturverzeichnis angegebenen Quellen, keine weiteren Hilfsmittel zur Anfertigung meiner Arbeit verwendet habe.