

Kritische Phänomene in frustrierten Spin-Systemen:  
Monte Carlo Simulationen auf  
Gittern mit nicht ganzzahliger  
Raumdimension

Diplomarbeit  
Gunnar Prüßner  
Freie Universität Berlin  
Fachbereich Physik  
Institut für Theoretische Physik

Unter Betreuung von Prof. Dr. Klaus-Dieter Schotte und Dr. Damien Loison



# Inhaltsverzeichnis

|          |                                                                                                          |           |
|----------|----------------------------------------------------------------------------------------------------------|-----------|
| <b>1</b> | <b>Grundbegriffe</b>                                                                                     | <b>5</b>  |
| 1.1      | Kritische Phänomene . . . . .                                                                            | 5         |
| 1.1.1    | Phasenübergänge . . . . .                                                                                | 5         |
| 1.1.2    | Phasenübergänge im Magneten . . . . .                                                                    | 6         |
| 1.1.3    | Kontinuierliche Phasenübergänge zweiter Ordnung in magnetischen Systemen: Kritische Exponenten . . . . . | 12        |
| 1.1.4    | Die Skalengesetze . . . . .                                                                              | 13        |
| 1.2      | Mean-Field-Theorie . . . . .                                                                             | 15        |
| 1.3      | Das <i>Landau-Ginzburg</i> -Modell . . . . .                                                             | 17        |
| 1.3.1    | <i>Landau</i> Theorie . . . . .                                                                          | 18        |
| 1.3.2    | <i>Gauß</i> -Modell . . . . .                                                                            | 22        |
| 1.4      | Renormierungsgruppe . . . . .                                                                            | 24        |
| 1.4.1    | Realspace-Renormierung . . . . .                                                                         | 24        |
| 1.4.2    | Renormierungsfluß . . . . .                                                                              | 29        |
| 1.5      | Symmetrien und Universalität . . . . .                                                                   | 31        |
| 1.5.1    | $O(n)/O(n-1)$ . . . . .                                                                                  | 32        |
| 1.5.2    | Kompliziertere Symmetrien . . . . .                                                                      | 33        |
| 1.5.3    | Das Stiefel-Modell . . . . .                                                                             | 36        |
| 1.5.4    | Symmetrien – Übersicht . . . . .                                                                         | 39        |
| 1.6      | Lösung des 2D- <i>Ising</i> . . . . .                                                                    | 39        |
| 1.6.1    | Exakte Lösungen . . . . .                                                                                | 39        |
| 1.6.2    | Approximative Lösung . . . . .                                                                           | 40        |
| 1.7      | Kritische Exponenten – Übersicht . . . . .                                                               | 42        |
| 1.7.1    | Kritische Exponenten in KT-Phasenübergänge . . . . .                                                     | 43        |
| <b>2</b> | <b>Numerische Methoden</b>                                                                               | <b>45</b> |
| 2.1      | Markov-Ketten . . . . .                                                                                  | 45        |
| 2.1.1    | Voraussetzungen für die Konvergenz . . . . .                                                             | 46        |
| 2.1.2    | Konvergenz . . . . .                                                                                     | 47        |
| 2.2      | Monte-Carlo-Algorithmen . . . . .                                                                        | 50        |
| 2.2.1    | Allgemeines . . . . .                                                                                    | 50        |
| 2.2.2    | Algorithmen . . . . .                                                                                    | 52        |
| 2.2.3    | Erzeugung von Zufallszahlen . . . . .                                                                    | 57        |
| 2.3      | Fehlerrechnung: Der Jackknife . . . . .                                                                  | 57        |
| 2.4      | FSS . . . . .                                                                                            | 60        |
| 2.5      | Dynamic <i>scaling</i> . . . . .                                                                         | 63        |

|          |                                                                                                            |            |
|----------|------------------------------------------------------------------------------------------------------------|------------|
| <b>3</b> | <b>Resultate</b>                                                                                           | <b>69</b>  |
| 3.1      | $\chi/\chi'$ -Methode . . . . .                                                                            | 69         |
| 3.1.1    | Einführung zur Methode . . . . .                                                                           | 69         |
| 3.1.2    | Anwendung auf 2D- <i>Ising</i> . . . . .                                                                   | 72         |
| 3.1.3    | Anwendung auf 3D- <i>Ising</i> . . . . .                                                                   | 75         |
| 3.2      | Das <i>Ising</i> -Modell auf einem <i>Sierpiński</i> -Teppich . . . . .                                    | 77         |
| 3.2.1    | Definition der Dimension . . . . .                                                                         | 78         |
| 3.2.2    | Das Gitter . . . . .                                                                                       | 79         |
| 3.2.3    | Statisches kritisches Verhalten . . . . .                                                                  | 79         |
| 3.2.4    | Probleme des FSS und Ergebnisse . . . . .                                                                  | 83         |
| 3.2.5    | Dynamisches kritisches Verhalten . . . . .                                                                 | 89         |
| 3.2.6    | Simulationen . . . . .                                                                                     | 89         |
| 3.2.7    | Berechnung des Fehlers der Exponenten . . . . .                                                            | 90         |
| 3.2.8    | Zusammenfassung . . . . .                                                                                  | 93         |
| 3.3      | Das $V_{2,2}$ -Stiefel-Modell auf fraktalen Gittern . . . . .                                              | 95         |
| 3.3.1    | Motivation und Stand der Forschung . . . . .                                                               | 95         |
| 3.3.2    | Algorithmen und simulierte Größen . . . . .                                                                | 96         |
| 3.3.3    | Ergebnisse bei $d_{\mathcal{H}} = 2.9656 \dots$ . . . . .                                                  | 99         |
| 3.3.4    | Ergebnisse bei $d_{\mathcal{H}} = 2.5 \dots$ . . . . .                                                     | 104        |
| 3.3.5    | Zusammenfassung und Kritik . . . . .                                                                       | 112        |
| 3.4      | Zusammenfassung und Ausblick . . . . .                                                                     | 113        |
|          | <b>Danksagung</b>                                                                                          | <b>115</b> |
|          | <b>Anhang</b>                                                                                              | <b>117</b> |
| <b>A</b> | <b>Heatbath-Algorithmus für XY-Spins</b>                                                                   | <b>117</b> |
| A.1      | Einleitung . . . . .                                                                                       | 117        |
| A.2      | Numerische Realisierung . . . . .                                                                          | 118        |
| <b>B</b> | <b>Jackknife: Verallgemeinerte Näherungen</b>                                                              | <b>121</b> |
| B.1      | Einleitung . . . . .                                                                                       | 121        |
| B.2      | Schätzer für ein Polynom . . . . .                                                                         | 121        |
| B.3      | Schätzer für einen Bruch . . . . .                                                                         | 123        |
| B.4      | Schätzer für die Varianz eines Polynoms . . . . .                                                          | 124        |
| B.5      | Schätzer für die Varianz eines Bruchs . . . . .                                                            | 125        |
| <b>C</b> | $\partial_{\beta} \langle M \rangle_t = \langle M \rangle_t \langle E \rangle_t - \langle ME \rangle_t$ ?  | <b>127</b> |
| C.1      | Einleitung . . . . .                                                                                       | 127        |
| C.2      | Beweisidee . . . . .                                                                                       | 127        |
|          | <b>Literaturverzeichnis</b>                                                                                | <b>135</b> |
|          | <b>Beilage 1: Artikel <i>A new approach to critical exponents in phase-transitions of spin-systems</i></b> |            |
|          | <b>Beilage 2: Artikel <i>Monte Carlo Simulation of a Ising Model on a Sierpiński Carpet</i></b>            |            |

# Vorwort

Es ist wohl angebracht, für den Umfang der vorliegenden Arbeit um Nachsicht zu bitten. Die Arbeit stellt die Zusammenfassung der Ergebnisse dar, die innerhalb von etwa 18 Monaten erarbeitet wurden. Das Verfassen dieser Arbeit selbst ist währenddessen möglicherweise zu sehr in den Hintergrund getreten, oder anderes gesagt: Im Vordergrund stand in dieser Zeit, einen kleinen aber brauchbaren Beitrag zur aktuellen Forschung zu leisten. Bereits während dieser 18 Monate wurden zwei Artikel verfaßt, die beide zur Veröffentlichung eingereicht sind (Physica A, akzeptiert am 29.02.2000 und Phys. Rev. B) und dieser Arbeit beiliegen sollten. Darüberhinaus wird ein dritter Artikel die Ergebnisse der Untersuchung des  $V_{2,2}$ -Stiefels auf fraktalen Gittern zusammenfassen, er liegt bisher jedoch nur in der Rohfassung vor. Da diese Ergebnisse auf einigen methodischen Neuerungen beruhen, die von Herrn *Loison* entwickelt und vom Autoren ergänzt wurden (Ansatz in Anhang C), wird sich die Zahl der Publikationen, die sich gewissermaßen in dieser Arbeit zusammenfinden, aller Voraussicht nach auf vier belaufen.

Daneben mag manches scheinbar etwas zu ausführlich geraten sein, so beispielsweise im Anhang. Die Motivation dabei war, den Gebrauchswert dieser Arbeit zu erhöhen und in diesem Rahmen einige Ergebnisse zu fixieren und zu verhindern, bestimmte Konzepte immer wieder neu erfinden zu müssen und Fehler zu wiederholen. Aus dem gleichen Grund wurde mit Referenzen nicht gespart.<sup>1</sup>

Sicherlich wird manchen Leser der sehr freizügige Gebrauch englischer Begriffe<sup>2</sup> im deutschen Text stören. Es gibt bei einer beachtlichen Zahl der verwendeten Begriffe ganz bestimmt mehr oder weniger gebräuchliche deutsche Alternativen. Über die Richtigkeit und Wichtigkeit der Verwendung der einen oder der anderen kann man die eine oder andere Überzeugung haben. Im konkreten Fall dieser Arbeit, bei der praktisch sämtliche Literatur auf englisch vorliegt und die überwältigende Mehrheit aller Diskussionen und Gespräche während der 18 Monate auf englisch geführt wurde, gibt es für den intensiven Gebrauch der englischen Sprache immerhin einen Anlaß.

---

<sup>1</sup>Um Mißverständnissen vorzubeugen, ist es wahrscheinlich wichtig zu betonen, daß die zitierten Artikel in drei etwa gleich große Klassen zerfallen: a) Vollständig oder größtenteils gelesen, b) in wichtigen Teilen gelesen, c) bloße Referenz

<sup>2</sup>Fremdsprachige Begriffe und Eigennamen sind im folgenden kursiv geschrieben.



# Einleitung

Phasenübergänge der Form  $O(n)/O(n-1)$  sind in der Theorie sehr gut verstanden. Für das einfachste Modell mit einer Ordnung bei endlichen Temperaturen, dem *Ising*-Modell [1], liegen sogar exakte Lösungen vor [2, 3]. Kompliziertere Modelle, wie etwa der dreidimensionale *Heisenberg*-Magnet werden vor allem mit Mitteln der Renormierungsgruppe (RG) behandelt. Die vorliegende Arbeit steht im Kontext der Renormierungsgruppe insofern, als daß sie ein Modell untersucht, das innerhalb der Renormierungsgruppe zu teilweise widersprüchlichen und umstrittenen Ergebnissen geführt hat [4, 5, 6, 7]. Das **Stiefel**-Modell besitzt einen Phasenübergang der Form  $O(n)/O(n-2)$  und sollte bei bestimmter Wahl von  $n$  und entsprechender Wahl der Raumdimension  $d$  einen Phasenübergang zweiter Ordnung zeigen, der zu einer neuen, der **chiralen** Universalitätsklasse [4] gehört. Bei  $n = 2$  wurde auf fraktalen Gittern mit Raumdimension  $d_H \approx 2.97$  und  $d_H = 2.5$  simuliert und die Phasenübergänge und kritischen Exponenten untersucht.

Im ersten Kapitel werden zunächst die theoretischen Grundbegriffe vorgestellt. Darauf folgt ein Kapitel über einige grundlegende numerische Methoden. Im letzten Kapitel sind dann die Ergebnisse der Arbeit zusammengefaßt. Es sei vorweggenommen, daß am Ende keine endgültige oder eindeutige Antwort auf die zentrale Frage gegeben werden kann, von welcher Ordnung der Phasenübergang bei  $d_H = 2.5$  ist. Die Resultate sind jedoch sehr spannend auch und vor allem hinsichtlich methodischer Gesichtspunkte.



# Kapitel 1

## Grundbegriffe

Die folgenden theoretischen Grundbegriffe stellen den Kontext dar, in den sich die vorliegende Arbeit eingliedert. Auf eine darüber hinausgehende, detaillierte Darstellung der Theorie der kritischen Phänomene wird verzichtet, da sie den Rahmen dieser Arbeit sprengen würde und es sich im wesentlichen um Lehrbuchwissen handelt [8, 9, 10, 11, 12, 13].

Es sei zu Beginn dieses Kapitels betont, daß sich die gesamte Arbeit ausschließlich mit kritischen Phänomenen in klassischen Systemen befaßt.

### 1.1 Kritische Phänomene

Etwas oberflächlich betrachtet bezeichnet der Begriff „kritische Phänomene“ solche physikalischen Vorgänge, die abrupt vor sich gehen und zu abrupt anderem Verhalten führen. Allgemein lassen sich alle Vorgänge, denen **Potenzgesetze** zugrundeliegen als kritisch bezeichnen [14]. Potenzgesetzen kommt eine so herausragende Rolle zu, weil sie ein **skalenfreies** Verhalten beschreiben: Hängt eine Größe von der Potenz einer anderen ab, so ändert sich daran bis auf einen Vorfaktor nichts, wenn die Skalen einer der beiden Größen verändert werden; das Verhalten bleibt auf allen Skalen dasselbe und die Graphen des Funktionsverlaufes lassen sich durch **lineare** Transformation der Skalen ineinander überführen. Es ist Gegenstand der Theorie der kritischen Phänomene dieses Verhalten zu untersuchen.

#### 1.1.1 Phasenübergänge

Neben anderen Prozessen umfaßt die Theorie der kritischen Phänomene vor allem **Phasenübergänge**. Sie sind dadurch gekennzeichnet, daß sich der noch zu definierende **Ordnungsparameter**, unter bestimmten Bedingungen, nämlich am **kritischen Punkt**, drastisch verändert oder aber dort überhaupt erst sinnvoll zu definieren ist, wie etwa bei der Dichtedifferenz zweier Phasen. Mit der abrupten Änderung des Ordnungsparameter ist eine Singularität in einem thermodynamischen Potential verbunden [9].

Nach der *Ehrenfest*'schen Klassifizierung (siehe in [15] den Verweis auf [16]) der Phasenübergänge wird ein Phasenübergang *n*ter Ordnung durch die Diskontinuität der *n*ten Ableitung der *Gibbs* freien Enthalpie nach der Temperatur definiert, während alle kleineren

Ableitungen stetig bleiben:

$$\left. \frac{\partial^m G_1}{\partial T^m} \right|_p = \left. \frac{\partial^m G_2}{\partial T^m} \right|_p \quad \text{für } m < n \quad (1.1)$$

$$\left. \frac{\partial^m G_1}{\partial p^m} \right|_T = \left. \frac{\partial^m G_2}{\partial p^m} \right|_T \quad \text{für } m < n \quad (1.2)$$

$$\left. \frac{\partial^n G_1}{\partial T^n} \right|_p \neq \left. \frac{\partial^n G_2}{\partial T^n} \right|_p \quad (1.3)$$

$$\left. \frac{\partial^n G_1}{\partial p^n} \right|_T \neq \left. \frac{\partial^n G_2}{\partial p^n} \right|_T \quad (1.4)$$

$G$  hängt zunächst wie in der Thermodynamik der Gase und Flüssigkeiten von den natürlichen Variablen  $T$  und  $p$  ab. Hier und im folgenden sei die Teilchenzahl  $N$  konstant.  $G_1$  bzw.  $G_2$  beziehen sich auf die erste bzw. zweite Phase.

Die heute gebräuchliche Klassifizierung weicht von der *Ehrenfest*'schen ab: Zum einen werden nicht nur Diskontinuitäten sondern vor allem Divergenzen beobachtet und untersucht, zum anderen wird bei den Übergängen höherer Ordnung nur noch von „kontinuierlichen Phasenübergängen“ gesprochen [11, 9, 17].

Der Unterschied zwischen den beiden Formen des Phasenüberganges läßt sich am deutlichsten veranschaulichen, wenn man die Entropie des Systems betrachtet,  $S = \left. \frac{\partial G}{\partial T} \right|_p$ . Sie ist markanterweise beim Phasenübergang erster Ordnung diskontinuierlich, während sie bei kontinuierlichen Phasenübergängen stetig bleibt. Direkt mit diesem Umstand verbunden ist das Auftreten einer **latenten Wärme** [18] beim Phasenübergang erster Ordnung,  $\Delta Q = T_0 \Delta S$ . Dabei bezeichnet  $T_0$  die Temperatur, bei der der Sprung auftritt. Die Bezeichnung „kritische Temperatur“  $T_c$  soll den kontinuierlichen Phasenübergänge vorenthalten sein.

Im Vordergrund dieser Arbeit steht die Auseinandersetzung mit kontinuierlichen Phasenübergängen, genauer Phasenübergänge zweiter Ordnung, während solche erster Ordnung nur identifiziert, jedoch nicht weiter charakterisiert wurden.

### 1.1.2 Phasenübergänge im Magneten

Für die weitere Erörterung ist es sinnvoll, von den in der Klassifikation der Phasenübergänge verwendeten Zustandsvariablen  $p$  und  $T$  zu den Variablen  $H$  und  $T$  überzugehen. Die Umschreibung  $p \rightarrow -H$  und entsprechend  $V \rightarrow M$  erscheint etwas unnatürlich, da zwar  $H$  wie  $p$  eine intensive Zustandsgröße darstellt und  $M$  wie  $V$  eine extensive, jedoch dann das totale Differential der inneren Energie  $dU = TdS + HdM$  werden würde. Das würde bedeuten, daß die innere Energie die Energie des äußeren Feldes mitenthielte, was einer natürlichen Sichtweise zuwiderläuft [9]. Man ersetzt daher  $p \rightarrow M$  und  $V \rightarrow H$ , so daß

$$dU = TdS - MdH \quad (1.5)$$

Diese Definition ist wie angedeutet nicht zwingend und daher auch nicht überall anzutreffen, so zum Beispiel nicht in [10].

Von (1.5) ausgehend werden nun alle weiteren thermodynamischen Potentiale definiert. Im Vordergrund steht dabei die Freie Energie, aus der sich die anderen Größen am elegantesten herleiten lassen. Sie soll zunächst für ein kanonisches Ensemble formuliert werden.

In einem diskreten System läßt sich Zustandssumme  $\mathcal{Z}$  schreiben als

$$\mathcal{Z} = \sum_{\mu} e^{-\beta E_{\mu}} \quad . \quad (1.6)$$

Die Summe erfolgt über alle möglichen Zustände  $\mu$  des Systems, wobei  $E_{\mu}$  die Energie des Mikrozustands  $\mu$  bezeichnet und  $\beta = 1/k_B T$ . Der Erwartungswert einer Observablen  $A$  ist dann der *Boltzmann*-gewichtete Mittelwert:

$$\langle A \rangle = \frac{1}{\mathcal{Z}} \sum_{\mu} A_{\mu} e^{-\beta E_{\mu}} \quad . \quad (1.7)$$

wobei  $A_{\mu}$  den Wert der Observablen  $A$  bezeichnet, wenn sich das System im Mikrozustand  $\mu$  befindet. Die innere Energie  $U$  ist dann der Erwartungswert der Energie:

$$U = \langle E \rangle = \frac{\sum_{\mu} E_{\mu} e^{-\beta E_{\mu}}}{\sum_{\mu} e^{-\beta E_{\mu}}} \quad (1.8)$$

$$= -\frac{\partial \ln(\mathcal{Z})}{\partial \beta} \quad . \quad (1.9)$$

Mit  $\left. \frac{\partial U}{\partial T} \right|_H = T \left. \frac{\partial S}{\partial T} \right|_H$  kann man integrieren und erhält

$$S = -k_B \beta \frac{\partial \ln(\mathcal{Z})}{\partial \beta} + k_B \ln(\mathcal{Z}) \quad . \quad (1.10)$$

wobei die auftretende Integrationskonstante durch den dritten Hauptsatz beseitigt wird. Wegen  $F = U - TS$  ist dann

$$F = -k_B T \ln(\mathcal{Z}) \quad , \quad (1.11)$$

woraus man wiederum die nützliche Beziehung

$$U = F + TS = F - T \left. \frac{\partial F}{\partial T} \right|_H = -T^2 \frac{\partial}{\partial T} \frac{F}{T} \quad (1.12)$$

$$= \langle E \rangle = -\frac{\partial}{\partial \beta} \ln \mathcal{Z} = \frac{\partial}{\partial \beta} \frac{F}{T} = -T^2 \frac{\partial}{\partial T} \frac{F}{T} \quad (1.13)$$

erhält.

Wie bereits oben angegeben sind Phasenübergänge zweiter Ordnung im strengen *Ehrenfest*'schen Sinne durch eine Diskontinuität in den zweiten Ableitungen der *Gibbs* Freien Enthalpie  $G$  definiert. Mit den hier angegebenen Umschreibungen ist nun jedoch die Freie Energie zu betrachten. Es ist dann definitionsgemäß das Divergieren der folgenden Größen zu erwarten:

$$c_H = \left. \frac{1}{V} \frac{\partial \langle E \rangle}{\partial T} \right|_H = -T \left. \frac{1}{V} \frac{\partial^2 F}{\partial T^2} \right|_H \quad \text{spezifische Wärme} \quad (1.14)$$

$$\chi = \left. \frac{\partial \langle M \rangle}{\partial H} \right|_T = -\frac{1}{V} \left. \frac{\partial^2 F}{\partial H^2} \right|_T \quad \text{Suszeptibilität} \quad (1.15)$$

wobei

$$\langle M \rangle = -\left. \frac{1}{V} \frac{\partial F}{\partial H} \right|_T \quad \text{Magnetisierungsdichte} \quad (1.16)$$

$$(1.17)$$

Die rechte Seite der ersten Zeile ergibt sich automatisch aus  $dF = -SdT - MdH$  und  $\langle E \rangle = U = F + TS$ . Die Magnetisierung bzw. die Magnetisierungsdichte sind bisher nicht erklärt worden. Sie treten explizit erst in (1.22) auf. Aufgrund der Definitionen (1.11) und (1.6) liegt es jedoch nahe, daß sie linear in die innere Energie eingeht.

Die Vorfaktoren  $\frac{1}{V}$  machen die Freie Energie zur Freien Energiedichte. Üblicherweise unterscheidet man nicht zwischen Magnetisierung und Magnetisierungsdichte; es ist selbstverständlich, daß alle extensiven Größen in sinnvoller Weise auf die Zahl der Teilchen normiert sein müssen. Auch auf die Unterscheidung zwischen  $M$  und  $\langle M \rangle$  sowie  $E$  und  $\langle E \rangle$  wird gemeinhin verzichtet.

Mit (1.11) und (1.6) lassen sich unter Verwendung von (1.7) die Definitionen sofort durch höhere Momente ausdrücken:

$$c_H = \frac{1}{k_B T^2} (\langle E^2 \rangle - \langle E \rangle^2) \quad (1.18)$$

$$\chi = \frac{1}{k_B T} (\langle M^2 \rangle - \langle M \rangle^2) \quad (1.19)$$

Beide Gleichungen sind Ausdruck der **linear response** oder des **Fluktuation–Dissipationstheorems**. Beide Begriffe haben ihren Ursprung darin, daß die beiden Ausdrücke (1.18) und (1.19) anzeigen, wie das System auf kleine Störungen von außen im ersten, dem linearen Term einer Entwicklung, reagieren. (1.18) und (1.19) bedeuten, daß die „Antworten“ in Energie bzw. Magnetisierung proportional zur Stärke ihrer **Fluktuationen** sind.

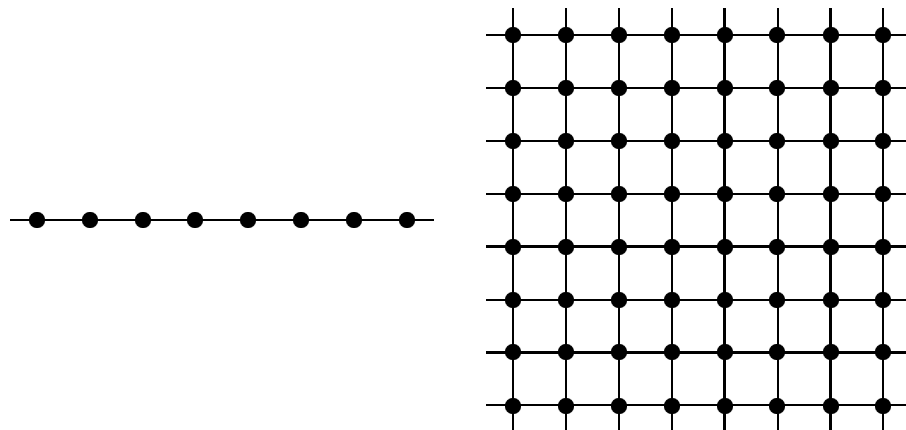
## Das Gitter

Nachdem die makroskopischen thermodynamischen Größen definiert wurden, muß das System erklärt werden, auf dem sie leben.

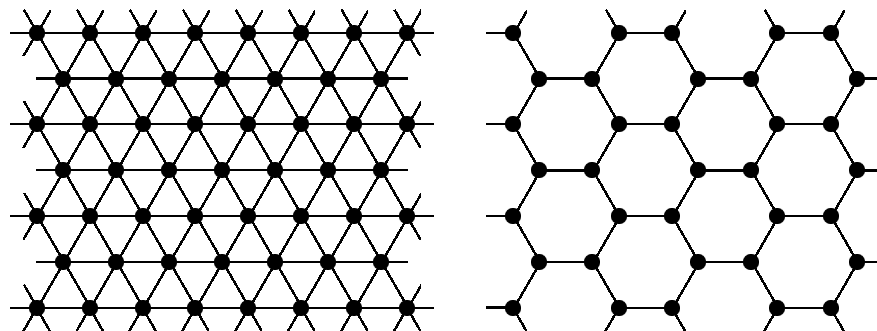
Kritische Phänomene in magnetische Systeme werden üblicherweise auf Gittern, also mit lokalisierten magnetischen Momenten, betrachtet, auch wenn es einige prominente Beispiele für den Bandmagnetismus mit itineranten Momenten gibt, wie Eisen, Kobalt oder Nickel [19]. Im Prinzip kommen beliebige Gitter in Frage. Das einfachste „Gitter“ ist die Spinkette mit Raumdimension  $d = 1$ , wie sie in Abb. 1.1 links dargestellt ist. Die schwarzen Kreise sollen dabei die lokalisierten magnetischen Momenten, die Spins, darstellen, die Verbindungslinie einen Wechselwirkungspfad oder **bond**. In Abb. 1.1 rechts ist das einfachste zweidimensionale Gitter dargestellt. Üblicherweise sind die Gitter translationsinvariant, wie in Abb. 1.2 und Abb. 1.3 links. In Abb. 1.3 rechts ist mit einem Ausschnitt der Penrose-Parkettierung [20, 21] ein nicht-translationsinvarianter Fall dargestellt (bei dem daneben auch nicht alle nächsten Nachbarn wechselwirken, sondern andere Paare).

## Reichweite der Wechselwirkung

In den Darstellungen 1.1-1.3 sind die Pfade miteingezeichnet, über die die Spins miteinander wechselwirken. Die Reichweite dieser Wechselwirkung spielt eine wesentliche Rolle. Man unterscheidet dabei **langreichweitig**, **kurzreichweitig** und **endlich** oder diskret. Bei kurzreichweitigen Wechselwirkungen fällt die Wechselwirkungsenergie mit dem Abstand  $r$  wie  $r^{-(d+\sigma)}$ , wobei  $\sigma > 2$  oder exponentiell [22, 23], wie dies beispielsweise für die Austauschwechselwirkung der Fall ist. Langreichweitige Wechselwirkungen, d.h.  $\sigma \leq 2$  führen zu einem gänzlich anderen kritischen Verhalten und werden im folgenden nicht weiter betrachtet; mit  $\sigma = -1$  ist die Coulomb-Wechselwirkung prominentester Vertreter langreichweitiger Wechselwirkung. Eine endliche Wechselwirkung hingegen endet bei einem



**Abbildung 1.1:** Verschiedene Gitter I: Links die Spinkette ( $d = 1$ ), rechts das Quadratgitter ( $d = 2$ )



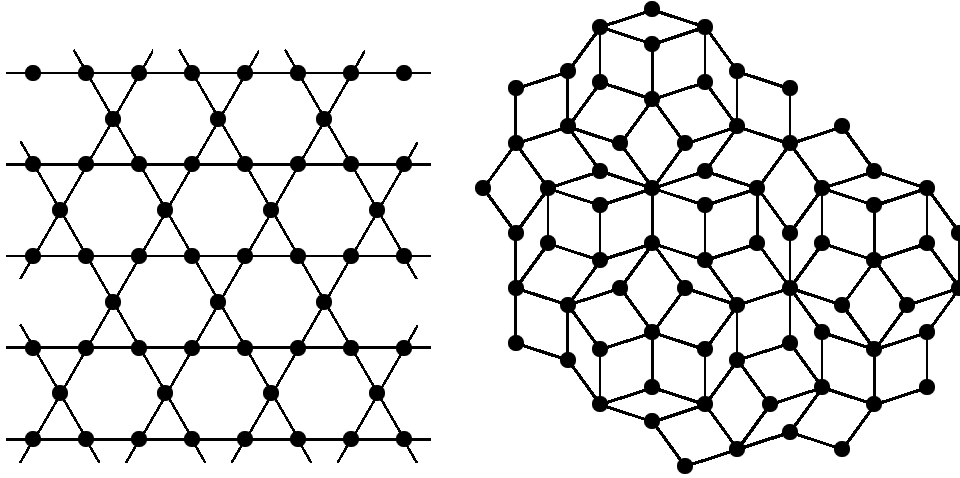
**Abbildung 1.2:** Verschiedene Gitter II: Links das Dreiecksgitter, rechts die Bienenwabe (Honeycomb)

bestimmten Abstand. Sie wird gelegentlich auch „ultralokale“ Wechselwirkung genannt. Die in dieser Arbeit dargestellten Modelle haben ausschließlich endliche Wechselwirkungen, die sich auf den nächsten Nachbarn beschränken, d.h. kürzestmöglich sind.

### Der Hamiltonian

Für die Wechselwirkung zwischen den Spins lassen sich beliebig komplizierte und auch Mehrteilchen-Wechselwirkungen ansetzen. Üblicherweise nimmt man auf dem Gitter jedoch  $J\mathbf{S}_i\mathbf{S}_j$  an, wobei der  $n$ -dimensionale Vektor  $\mathbf{S}_i$  die Magnetisierung des  $i$ ten Spin im System bezeichnet und  $J$  die Wechselwirkung parametrisiert. Daß dieser Wechselwirkung die Austauschkopplung zugrundeliegt, ist dabei für das Modell nicht weiter von Bedeutung. Damit läßt sich der Hamiltonian, d.h. die innere Energie notieren:

$$\mathcal{H} = -J \sum_{i.nn.j} \mathbf{S}_i \mathbf{S}_j \quad . \quad (1.20)$$



**Abbildung 1.3:** Verschiedene Gitter III: Links das Kagomé-Gitter, rechts ein Ausschnitt einer Penrose-Parkettierung

Dabei bedeutet  $i.nn.j$ , daß die Summe über alle Paare nächster Nachbarn läuft, also Wechselwirkung nur zwischen zwei benachbarten Spins herrschen soll. Der Vektor des  $i$ ten Spins  $\mathbf{S}_i$  muß jedoch noch in seiner Länge beschränkt werden, um die Minimierung der Freien Energie zu ermöglichen. Üblicherweise setzt man  $|\mathbf{S}_i| = 1$ . Bisher wurde die Dimension des Spins  $n$  nicht näher spezifiziert. Setzt man  $n = 1$  und daher  $\mathbf{S}_i \in \{-1, 1\}$ , so bezeichnet man die Spins auch als **Ising-Spins**. Mit  $n = 2$  erhält man **XY-Spins** oder einen **plane rotator** mit  $n = 3$  **Heisenberg-Spins**.

Man erkennt an (1.20), daß für  $J > 0$  die Parallelstellung der Spins, d.h. eine **ferromagnetische** Ordnung energetisch favorisiert ist. Für  $J < 0$  ist hingegen eine antiparallele, **antiferromagnetische** Stellung bevorzugt. Da ein geordneter Zustand offenbar eine geringere Entropie als ein ungeordneter oder **paramagnetischer** Zustand hat, tritt die **langreichweitige Ordnung** erst ein, wenn das System tief genug abgekühlt ist. Diese **Phase** wird auch Tieftemperaturphase, abgekürzt **LTP**, genannt, die paramagnetische, also ungeordnete oder symmetrische Phase entsprechend Hochtemperaturphase, **HTP**. Die Ordnung des Systems wird durch den **Ordnungsparameter** charakterisiert. Der Ordnungsparameter wird in allen Fällen eine dem Problem angepasste Definition der **Magnetisierung** sein.

Im einfachsten Fall ist die Magnetisierung  $\mathbf{M}$  definiert als die Summe aller magnetischen Momente:

$$\mathbf{M} = \sum_i \mathbf{S}_i \quad . \quad (1.21)$$

Da jedoch die Wechselwirkung zwischen Spins invariant ist gegen die Rotation der beiden Partner, erhält in der Zustandssumme jede Magnetisierungsrichtung das gleiche statistische Gewicht. Der Erwartungswert der Magnetisierung,  $\langle \mathbf{M} \rangle$  verschwindet daher. Wird der Hamiltonian jedoch um die Wechselwirkungsenergie mit dem äußeren Feldes  $\mathbf{H}$  erweitert

$$\mathcal{H} = -J \sum_{i.nn.j} \mathbf{S}_i \mathbf{S}_j - \mathbf{H} \mathbf{M} \quad , \quad (1.22)$$

wird auch die Magnetisierung feldabhängig und die gesuchte **spontane Magnetisierung**

$\mathbf{M}_s$  und damit der Ordnungsparameter lassen sich definieren als [24, 25]

$$\mathbf{M}_s = \lim_{\mu \rightarrow 0+} \langle \mathbf{M} \rangle (\mu \mathbf{H}_0) \quad , \quad (1.23)$$

wobei die Richtung des Feldes  $\mathbf{H}_0$  fest vorgegeben ist und mit  $\mu$  nur seine Stärke variiert wird. Es ist üblich diese feine Unterscheidung zwischen Magnetisierung und *spontaner* Magnetisierung nicht zu machen und man verwendet  $\mathbf{M}$  als Bezeichnung für die spontane Magnetisierung. Darüberhinaus bleibt auch die spontane Magnetisierung in endlichen Systemen ohne äußeres Feld symmetrisch verteilt. Erst der thermodynamische Limes, d.h. der Übergang zu unendlich ausgedehnten Systemen ermöglicht eine Symmetriebrechung, die **spontane Symmetriebrechung** oder *spontaneous symmetry breaking* im Ordnungsparameter, die kennzeichnend für einen Phasenübergang ist.

Überraschenderweise findet man für die unendlich ausgedehnte Spinkette, wie sie in Abb. 1.1 links dargestellt ist, keine spontane Magnetisierung bei endlichen Temperaturen. Dies läßt sich jedoch leicht verstehen, wenn man für die periodisch geschlossene endliche Kette eingehender untersucht [8]: Angenommen, es hätte sich eine ferromagnetische Ordnung eingestellt, so würde das Umlappen eines beliebig langen Abschnitts der Kette bei einem Hamiltonian der Form (1.22) die Energie  $4J$  kosten. Die Entropie der Umgebung würde demnach um  $4J/T$  abnehmen. Gleichzeitig gibt es für die Lage des Abschnitts  $N(N-1)$  Möglichkeiten, wenn die Kette  $N$  Plätze hat, d.h. die Entropie würde sich um  $\approx 2k_B \ln(N)$  erhöhen. Das bedeutet jedoch, daß für jede Temperatur ein  $N$  existiert, so daß das Umlappen eines ganzen Abschnittes des Ringes zu einem Entropiezuwachs führt. Der *Ising*-Ring ordnet deshalb nicht bei endlichen Temperaturen und hat daher keinen Phasenübergang bei  $T \neq 0$ .

Das zweidimensionale *Ising*-Modell, kurz *2D-Ising*, bei dem auf einem Quadratgitter die Spins miteinander wechselwirken, wie in Abb. 1.1 rechts dargestellt, besitzt hingegen eine endliche Ordnungstemperatur. Es wird am Ende dieses Kapitels näher erläutert.

### **Mermin–Wagner-Theorem und Kosterlitz–Thouless Phasenübergänge**

Untersucht man nun Phasenübergänge in zweidimensionalen Systemen mit zwei- und höherdimensionalen Spin, also für  $d = 2$  und  $n \geq 2$ , so findet man, daß sich bei endlichen Temperaturen und kurzreichweitiger Wechselwirkung keine Ordnung einstellt. Jede Ordnung wird von Spinwellen, den **Magnonen** beliebig kleiner Anregungsenergie wieder zerstört. Dieses Theorem heißt **Mermin–Wagner–Theorem** [26]; die Originalarbeit befaßt sich zwar mit Phasenübergängen von *Heisenberg*-Magneten, d.h.  $n = 3$ , jedoch in quantisierten Systemen. Solche Systeme lassen sich klassisch als  $n - 1$ -dimensional auffassen. 1973, sieben Jahre nach Erscheinen des Artikels von *Mermin* und *Wagner*, zeigten *Kosterlitz* und *Thouless*, daß es im 2D-XY-Modell dennoch zu einem Phasenübergang kommt [27, 28, 29, 30]. Die dabei beobachtete Ordnung ist nicht eine magnetische Ordnung im herkömmlichen Sinne und stellt daher auch nicht die Ergebnisse von *Mermin* und *Wagner* in Frage. Es handelt sich beim **Kosterlitz–Thouless-Phasenübergang** (KT) vielmehr um einen Phasenübergang durch eine „langreichweitige topologische Ordnung“ [31]. Eine zentrale Rolle spielen dabei Paare von sog. Vortices und Antivortices, die bei tiefen Temperaturen binden. Das Modell bleibt in der gesamten Tieftemperaturphase kritisch.

Es ist also falsch, das *Mermin–Wagner*-Theorem als Verbot von Phasenübergängen aufzufassen. Daneben ist es auf kurzreichweitige Wechselwirkung beschränkt, da langreichweitige Wechselwirkung sogar eine spontane Magnetisierung im eindimensionalen *Ising*-Modell bewirken kann [32].

### 1.1.3 Kontinuierliche Phasenübergänge zweiter Ordnung in magnetischen Systemen: Kritische Exponenten

Nähert sich das System seinem kritischen Punkt, d.h. werden die äußeren Parameter, hier  $H$  und  $T$ , entsprechend eingestellt, so divergieren dort typischerweise die zweiten Ableitungen mit Potenzgesetzen:

$$c_H \propto |T - T_c|^{-\alpha} \quad T \neq T_c, T \rightarrow T_c \text{ und } H = H_c \quad (1.24)$$

$$\chi \propto |T - T_c|^{-\gamma} \quad T \neq T_c, T \rightarrow T_c \text{ und } H = H_c \quad . \quad (1.25)$$

$T_c$  und  $H_c$  bezeichnen dabei die kritische Temperatur bzw. das kritische Feld am kritischen Punkt. Im Standardfall ist  $H_c = 0$ .

Wegen  $\chi \propto (\langle M^2 \rangle - \langle M \rangle^2)$  (1.19) bedeutet das Divergieren von  $\chi$  gleichzeitig das Divergieren der Varianz von  $M$  und damit das Auftreten beliebig großer Fluktuationen von  $M$  im Ensemblemittel. Dies ist ein wesentliches Merkmal von Phasenübergänge zweiter Ordnung: Die Fluktuationen werden beliebig groß und zwar sowohl im Raum als auch im Ensemblemittel. Im Rahmen der linear-response heißt es: die Antworten divergieren.

Neben diesen Divergenzen gibt es in der ferromagnetischen Phase eine nicht verschwindende spontane Magnetisierung. Auch sie ist in der Nähe des Phasenüberganges nicht-analytisch und hängt vom äußeren Feld ebenfalls mit einem Potenzgesetz ab:

$$M \propto |T - T_c|^\beta \quad T < T_c, T \rightarrow T_c \text{ und } H = H_c \quad (1.26)$$

$$M \propto H^{1/\delta} \quad T = T_c \text{ und } H \rightarrow H_c \quad (1.27)$$

Diese vier Gleichungen (1.24) - (1.27) sind die Definitionsgleichungen der kritischen Exponenten  $\alpha, \beta, \gamma$  und  $\delta$ .

Um eine logarithmische Singularität mit einzuschließen, notiert man für  $c_H$  auch  $c_H \propto \alpha^{-1} |T - T_c|^{-\alpha}$ , da  $\lim_{\alpha \rightarrow 0+} \alpha^{-1}(x^\alpha - 1) = \ln(x)$ .

Weitere kritische Exponenten lassen sich über die Korrelationsfunktionen definieren. Die **Zwei-Punkt-Korrelationsfunktion** ist definiert als

$$G^{(2)}(i, j) = \langle \mathbf{S}_i \mathbf{S}_j \rangle \quad . \quad (1.28)$$

Diese Funktion soll einen Zugang zur Korrelation der beiden Spins am Ort  $i$  bzw.  $j$  bieten. In der ferromagnetischen Phase, wenn im gesamten Gitter eine Spinrichtung vorherrscht, mißt die Funktion jedoch nicht mehr allein die Korrelation. Man berechnet daher die **verbundene Korrelationsfunktion**  $G_c^{(2)}(i, j)$

$$G_c^{(2)}(i, j) = \langle \mathbf{S}_i \mathbf{S}_j \rangle - \langle \mathbf{S}_i \rangle \langle \mathbf{S}_j \rangle \quad . \quad (1.29)$$

Wenn das Gitter isotrop und homogen ist, hängen beide Funktionen nur vom Abstand der beiden betrachteten Spins ab und es wird:

$$G^{(2)}(|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|) = \langle \mathbf{S}_i \mathbf{S}_j \rangle \quad (1.30)$$

$$G_c^{(2)}(|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|) = \langle \mathbf{S}_i \mathbf{S}_j \rangle - \langle \mathbf{S} \rangle^2 \quad , \quad (1.31)$$

wobei  $\mathbf{r}_i$  den Ort des  $i$ ten Spins im Gitter bezeichnet. Bildet man die Fouriertransformierte dieser Größe  $\tilde{G}$ , findet man mit (1.19) bis auf Vorfaktoren

$$\chi = \beta \tilde{G}_c(\mathbf{k} = 0) \quad . \quad (1.32)$$

In der Nähe des kritischen Punktes beobachtet man für die Korrelationsfunktion

$$\begin{aligned} G_c^{(2)}(\mathbf{r}) &\propto \frac{1}{r^{d-2+\eta}} & T = T_c, H = H_c \text{ und } r \text{ ausreichend groß} \\ G_c^{(2)}(\mathbf{r}) &\propto e^{-r/\xi} & T \neq T_c, T \rightarrow T_c, H = H_c \text{ und } r \text{ ausreichend groß} \end{aligned}$$

wobei

$$\xi \propto |T - T_c|^{-\nu}$$

Die **Korrelationslänge**  $\xi$  ist die charakteristische Länge des Systems. Divergiert sie, so ist das Verhalten des System auf allen Längeskalen dasselbe, es wird **skaleninvariant**. In der Tat beobachtet man am kritischen Punkt Cluster gleicher Magnetisierungsrichtung auf allen Längeskalen, während in der Hochtemperaturphase kleine Cluster, in der Tieftemperaturphase große Cluster dominieren. Das Auftreten von *Clustern* auf allen Längeskalen ist nichts anderes als das Auftreten beliebiger **räumlicher Fluktuationen** des Ordnungsparameters.

Die hier angegebenen Divergenzen sind nur eine erste Näherung. Üblicher ist eine Darstellung der Form

$$\chi \propto |T - T_c|^{-\gamma} (1 + a_1 |T - T_c|^{\omega_1} + a_2 |T - T_c|^{\omega_2} + \dots) \quad . \quad (1.33)$$

Den ersten Korrekturterm bzw. den Exponenten  $\omega_1$  nennt man **correction to scaling** [33]. Da er in diesem Kapitel nicht weiter diskutiert wird, sei vorweggenommen, daß die *correction to scaling* aus dem absolut größten, also betraglich kleinsten, negativen Exponenten  $y_i$  (1.106) stammt. Im zweidimensionalen *Ising*-Modell bleiben die Korrekturen analytisch, die  $\omega_i$  sind also ganzzahlig (s. 3.1).

### Kritisches Verhalten in endlichen Systemen

In endlichen Systemen können keine Divergenzen der Fluktuationen auftreten, erst recht nicht wenn sie numerisch bestimmt werden. In der Nähe der kritischen Temperatur beobachtet man daher statt eines Peaks ein endliches, abgerundetes Maximum in Abb. 1.4 gestrichelt dargestellt. Wenn das untersuchte Systeme problemlos skalierbar ist, läßt sich recht gut bestimmen, ab wann diese sog. **finite-size-Korrekturen** (FS-Korrekturen) oder das **finite size scaling** (FSS) wichtig sind: Sie spielen offenkundig dann eine Rolle, wenn das Verhalten der beiden Systeme, des ursprünglichen bzw. des vergrößerten, voneinander abweichen. Berechnet man gleichzeitig die Korrelationslänge findet man typischerweise, daß das Verhalten keine Korrekturen zeigt, sofern  $6\xi < L^1$  [34], was mit der natürlichen Forderung  $\xi \ll L$  korrespondiert. Da FSS die Grundlage der gleichnamigen Methode innerhalb der Numerik darstellt, wird sie im Kapitel (2.4) eingehender diskutiert.

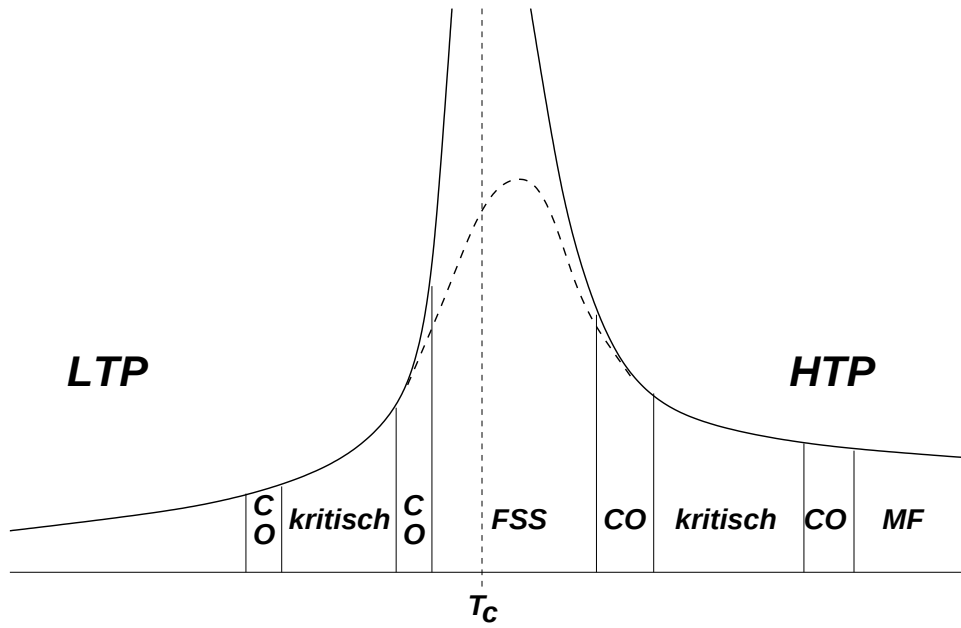
Abb. 1.4 zeigt die Namen der verschiedenen „Abschnitte“ typischem kritischem Verhaltens. Dabei bezeichnet „CO“ **crossover**- oder Übergangs-Verhalten. Weit entfernt von der kritischen Temperatur zeigen viele Systeme, wie etwa das 3D-*Ising*-Modell [35], wieder klassisches Verhalten (in der Zeichnung „MF“) und vorausgesetzt die o.g. thermodynamischen Größen wie Suszeptibilität und spezifische Wärme lassen sich noch durch ein Potenzgesetz darstellen, so sind die Exponenten dort ebenfalls die klassischen [36].

#### 1.1.4 Die Skalengesetze

Zwischen den sechs kritischen Exponenten,  $\alpha, \beta, \gamma, \delta, \eta$  und  $\nu$  gelten allgemeine Beziehungen, die **Skalengesetze**. Sie wurden zunächst als Skalenrelationen hergeleitet (s. [10]).

---

<sup>1</sup>Der Faktor 6 soll hier nur als handliche Faustregel dienen und gilt selbstredend nicht in jedem System. Er hängt außerdem natürlich davon ab, mit welcher Genauigkeit der thermodynamische Limes betrachtet werden soll.



**Abbildung 1.4:** Die Bezeichnungen für die verschiedenen Abschnitte eines Systems in der Nähe des kritischen Punktes. LTP: Tieftemperaturphase; HTP: Hochtemperaturphase; CO: Crossover; FSS: Finite *size* scaling; MF: Mean-Field-artiges, klassisches Verhalten

Diese Relationen werden mit der **Skalenhypothese**, die zuerst von *Widom* formuliert wurde [37, 38], zu Skalengleichungen. Die Hypothese, daß die Freie Energie  $F$  eine verallgemeinerte homogene Funktion in  $t = (T - T_c)/T_c$  und  $H$  ist, wird durch die Renormierungsgruppe (RG) bestätigt [39]. Im folgenden sollen die beiden Skalengesetze von *Rushbrooke* und *Widom* erörtert werden.

Es wird angenommen, der singuläre Teil der Freien Energie  $f_s(t, h)$  sei eine verallgemeinerte homogene Funktion der folgenden Form:

$$f_s(t, h) = |t/t_0|^{d/y_t} \Phi\left(\frac{h/h_0}{|t/t_0|^{y_h/y_t}}\right) . \quad (1.34)$$

Dabei ist

$$t = (T - T_c)/T_c \quad (1.35)$$

ein Maß für die Temperatur und  $h$  ein Maß für das äußere Feld,  $t_0$  und  $h_0$  sind die sog. **Skalenfaktoren**. Die spezifische Wärme ist proportional zu  $\left.\frac{\partial^2 f}{\partial t^2}\right|_h$ , daher

$$\alpha = 2 - \frac{d}{y_t} . \quad (1.36)$$

Für die spontane Magnetisierung  $\left.\frac{\partial f}{\partial h}\right|_t$  ergibt sich

$$\beta = \frac{d - y_h}{y_t} \quad (1.37)$$

und über die Suszeptibilität  $\left.\frac{\partial^2 f}{\partial h^2}\right|_t$

$$\gamma = \frac{2y_h - d}{y_t} . \quad (1.38)$$

Für die Abhängigkeit der Magnetisierung vom äußeren Feld ergibt sich

$$\delta = \frac{y_h}{d - y_h} . \quad (1.39)$$

Da alle genannten Exponenten nur von  $y_t$  und  $y_h$  abhängen lassen sich nun zwei unabhängige Gleichungen schreiben,

$$\alpha + 2\beta + \gamma = 2 \quad \text{Rushbrooke-law [13]} \quad (1.40)$$

$$\beta(\delta - 1) = \gamma \quad \text{Widom-law [13]} . \quad (1.41)$$

Die zwei noch fehlenden Skalengesetze von *Fisher* und *Josephson* stehen in Zusammenhang mit der Korrelationsfunktion, was hier jedoch nicht genauer betrachtet werden soll. Die beiden Gesetze lauten

$$\nu d = 2 - \alpha \quad \text{Josephson-law [40, 41]} \quad (1.42)$$

$$\gamma = \nu(2 - \eta) \quad \text{Fisher-law} . \quad (1.43)$$

Dabei nimmt das von Josephson-Skalengesetz eine herausragende Position ein, da es als einziges die Raumdimension direkt enthält. Man bezeichnet es auch als **Hyperscaling**.

Alle anderen Skalengesetze, wie etwa das von *Griffiths* (s. z.B. [10]) lassen sich aus diesen vier Gleichungen (1.40-1.43) herleiten. Damit gibt es nur 2 unabhängige kritische Exponenten, wie es auch nur zwei äußere Felder [12] gibt,  $H$  und  $T$ , entsprechend den beiden oben verwendeten Exponenten  $y_h$  und  $y_t$ .

## 1.2 Mean-Field-Theorie

Die Mean-Field-Theorie oder auch **Molekularfeld-Näherung**, kurz **MF**, bietet einen direkten, natürlichen Zugang zu kritischen Phänomenen. Leider weichen ihre Ergebnisse in aller Regel von den „richtigen“ ab, was darüberhinaus auf ihren konstituierenden Ansatz zurückzuführen ist, nämlich lokale Größen durch deren Mittelwert zu ersetzen. Dennoch darf ihre Bedeutung nicht unterschätzt werden, zumal sie in bestimmten Systemen den einzig gangbaren Weg darstellt [42]. *P.E. Weiss* hat die MF-Theorie begründet und sie war lange Zeit die einzige Theorie der Phasenübergänge überhaupt.

Die MF-Theorie soll hier anhand des d-dimensionalen ferromagnetischen *Ising*-Modells vorgestellt werden [8]. Berechnet wird der Erwartungswert des Spins  $s_i$ :

$$\langle s_i \rangle = \frac{\sum_{s_i \in \{-1,1\}} s_i \exp \left[ \beta (\sum_j J s_i s_j + s_i H) \right]}{\sum_{s_i \in \{-1,1\}} \exp \left[ \beta (\sum_j J s_i s_j + s_i H) \right]} \quad (1.44)$$

$$= -\tanh \left( \beta \left( \sum_j J s_j + H \right) \right) , \quad (1.45)$$

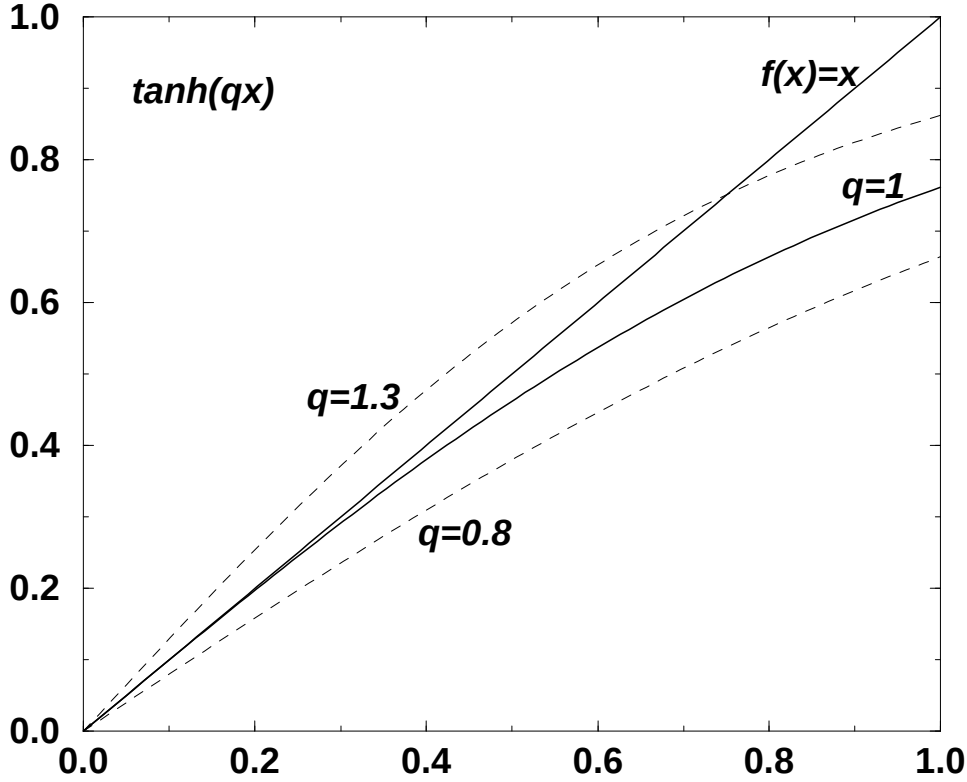
wobei  $J > 0$ , also oBdA  $J = 1$ . Die Summen laufen jeweils über die  $z$  nächsten Nachbarn.

Dieser Erwartungswert läßt sich nur berechnen, indem über alle Konfigurationen der Nachbarspins  $s_j$  summiert und jede Konfiguration mit dem richtigen statistischen Gewicht versehen wird. Dieses Gewicht läßt sich wiederum nur über die Konfigurationen der Nachbarn der Nachbarn finden usw. Ein Ausweg bietet die Ersetzung der  $s_j$  in (1.45) durch ihre Erwartungswerte  $\langle s_j \rangle$ . Dann wird auf Grund der Translationsinvarianz  $\langle s_i \rangle = \langle s_j \rangle = \langle m \rangle$ :

$$\langle m \rangle = \tanh \left[ \beta (z \langle m \rangle + H) \right] . \quad (1.46)$$

Die Ersetzung  $s_j \rightarrow \langle s_j \rangle$  bedeutet jedoch Fluktuationen zu ignorieren, die weiter oben jedoch als wesentlich für den Phasenübergang identifiziert wurden. Es ist daher bereits an dieser Stelle klar, daß MF-Theorie Phasenübergänge nicht in allen wichtigen Aspekten beschreiben kann.

Für den im folgenden betrachteten Fall,  $H = 0$ , läßt sich Gleichung (1.45) zwar bis auf die triviale Lösung nicht exakt lösen, jedoch kann man sehr leicht eine graphische bzw. eine numerische Lösung angeben.



**Abbildung 1.5:**  $f(x) = x$  und  $\tanh(qx)$  aufgetragen für verschiedene  $q$ ; Es muß  $q \geq 1$  sein, damit sich neben der trivialen Lösung  $x = \tanh(qx)$  auch eine nicht-triviale findet.

Es ist in Abb. 1.5 zu erkennen, daß  $\tanh(x)$  für  $x > 0$  eine konkave Funktion ist und daher  $x = \tanh(xq)$  für ein spezielles  $q$  im nicht-trivialen Fall zunächst in der Nähe des Ursprungs erfüllt ist. Fordert man also  $(\tanh(qx))' = q/\cosh^2(qx) \geq 1$ , findet man  $q \geq 1$ . Mit (1.46) bedeutet das, daß eine spontane Magnetisierung  $\langle m \rangle$  für alle  $\beta z \geq 1$  existiert, also

$$\beta_c = 1/z \quad . \quad (1.47)$$

Um nun kritische Exponenten zu bestimmen, muß (1.46) umgeschrieben werden. Mit  $t = (T - T_c)/T_c$  und  $h = \beta H$  ist dann

$$\langle m \rangle = \tanh \left[ \frac{\langle m \rangle}{1+t} + h \right] \quad . \quad (1.48)$$

Für kleine  $\langle m \rangle$  und  $h$  läßt sich entwickeln:

$$\langle m \rangle \approx \frac{\langle m \rangle}{1+t} + h - \frac{1}{3} \left( \frac{\langle m \rangle}{1+t} + h \right)^3 + \dots \quad (1.49)$$

Für  $h = 0$  ist demnach  $\langle m \rangle \propto |t|^{1/2}$  und für  $\left. \frac{\partial \langle m \rangle}{\partial h} \right|_{h=0} \propto |t|^{-1}$  und so ergeben sich die kritischen Exponenten der MF-Theorie zusammen mit den Skalengesetzen zu:

$$\begin{aligned}\alpha &= 0 \\ \beta &= 1/2 \\ \gamma &= 1 \\ \delta &= 3 \\ \eta &= 0 \\ \nu &= 1/2\end{aligned}$$

Auffallend an diesen Ergebnissen ist, daß die kritischen Exponenten innerhalb von MF unabhängig von der Raum- und Spindimension sind, wenngleich deren bestimmende Rolle bereits bekannt ist. Nicht einmal die Koordinationszahl  $z$  ist mehr enthalten und spielt nur noch für die kritische Temperatur eine Rolle. Trotzdem haben die Ergebnisse ihren Gültigkeitsbereich, nämlich für alle üblichen ferro-/paramagnetischen Übergänge (genauer: Für Phasenübergänge der Form  $O(n)/O(n-1)$ , jedoch wird diese Bezeichnung erst in 1.5.1 eingeführt) in Raumdimensionen  $d \geq d_c = 4$ .  $d_c$  ist die sog. **obere kritische Dimension**. Die untere kritische Dimension ist 2, wobei *Ising*-Systeme mit sog. unendlicher *ramification order* auch noch bei kleineren, gebrochenen Hausdorff-Dimensionen  $> 1$  bei endlichen Temperaturen ordnen.

### 1.3 Das Landau-Ginzburg-Modell

Das *Landau-Ginzburg*-Modell (*Landau*: Nobelpreis 1962) ist das wichtigste allgemeine Modell der Theorie der Phasenübergänge überhaupt. Die magnetischen Momente liegen dabei nicht mehr diskretisiert auf dem Gitter vor, sondern als lokale Magnetisierungsdichte, also als  $n$ -dimensionales Feld im  $d$ -dimensionalen Raum. Entsprechend geht der oben genannte Hamiltonian in eine Wirkungsdichte über [43]

$$\mathcal{H}_{LG}(\mathbf{x}) = \frac{1}{2}c[\nabla\phi(\mathbf{x})]^2 + \frac{1}{2}r_0\phi^2(\mathbf{x}) + u_0\phi^4(\mathbf{x}) - \mathbf{h}(\mathbf{x})\phi(\mathbf{x}) \quad , \quad (1.50)$$

wobei  $h = \beta H$  das **source field** [8] bezeichnet. Es verwundert nicht, daß außer im Term  $\mathbf{h}(\mathbf{x})\phi(\mathbf{x})$  keine ungeraden Potenzen von  $\phi(\mathbf{x})$  auftreten, der Hamiltonian soll natürlich invariant gegenüber Vorzeichenwechsel von  $\phi(\mathbf{x})$  sein.

Ebenso wie  $h$  tragen auch alle anderen vorkommenden Parameter bereits einen Vorfaktor  $\beta$ :  $c = \tilde{c}\beta \geq 0$ ,  $u_0 = \tilde{u}\beta$  und  $r_0 = \alpha_0 t\beta \geq 0$  wobei für  $t$  (1.35) gilt.

Aus der Zustandssumme wird ein Funktionalintegral [8]:

$$\mathcal{Z}_{LG} = \int \mathcal{D}\phi e^{-\int d^d\mathbf{x} \mathcal{H}_{LG}(\mathbf{x})} \quad . \quad (1.51)$$

Das *Landau-Ginzburg*-Modell ist ein verallgemeinertes Modell zur Behandlung der oben dargestellten, wie 2D-*Ising* oder *Heisenberg*-Spins auf einem kubischen Gitter. Insofern ist es ein Metamodell. Es führt neue **Kopplungen**  $c$ ,  $r_0$  und  $u_0$  ein, die von denen des ursprünglichen Modells in zunächst nicht näher bestimmter Weise abhängen.

Die folgenden Abschnitte sind an die entsprechenden Kapitel in [8] und [43] sowie [12] angelehnt.

### 1.3.1 Landau Theorie

Solange der Funktionenraum keinen Beschränkung unterliegt, ist Gleichung (1.51) in dieser Form nicht wohldefiniert. Einen natürlichen und einfachen Zugang bietet dennoch die *Landau*-Theorie. Dabei wird der Integrand in (1.51) bis auf einen Vorfaktor  $Q$  einfach durch sein Maximum ersetzt  $\mathcal{Z}_{LG} = Q\mathcal{Z}_L$ . Dabei ist  $\mathcal{Z}_L$  definiert durch

$$\mathcal{Z}_L = e^{-\int d^d \mathbf{x} \mathcal{H}_{LG}(\phi_0)} \quad , \quad (1.52)$$

wobei  $\phi_0$  den Hamiltonian (1.50) minimiere. Dieses Minimum ist notwendig mit  $\nabla\phi \equiv 0$  in (1.50) verbunden, also  $\phi(\mathbf{x}) \equiv \phi_0$  und damit

$$\int d^d \mathbf{x} \mathcal{H}_{LG}(\mathbf{x}) = V \left( \frac{1}{2} r_0 \phi_0^2 + u_0 \phi_0^4 - h_0 \phi_0 \right) \quad . \quad (1.53)$$

$\nabla\phi \equiv 0$  bedeutet jedoch das völlige Ausschließen von räumlichen Fluktuationen, obwohl diese eine wesentliche am Phasenübergang spielen. Es ist daher zu erwarten, daß die *Landau*-Theorie nur beschränkt in der Lage sein wird, Phasenübergänge zu beschreiben und Ergebnisse ähnlich denjenigen der MF-Theorie sein werden.

In (1.53) wurde ein räumlich konstantes *source* field  $\mathbf{h}(\mathbf{x}) \equiv \mathbf{h}_0$  angenommen, so daß sich ein  $h_0$  finden läßt mit  $\mathbf{h}_0 \phi_0 = h_0 \phi_0$ . Damit wird aus (1.53)

$$\int d^d \mathbf{x} \mathcal{H}_{LG}(\phi_0) = V \left( \frac{1}{2} r_0 \phi_0^2 + u_0 \phi_0^4 - h_0 \phi_0 \right) \quad . \quad (1.54)$$

Setzt man diese Gleichung in (1.52) ein, so ergibt sich mit  $\mathcal{Z}_{LG} = Q\mathcal{Z}_L$  für die Freie Energiedichte wegen  $F = -\frac{1}{\beta} \ln(\mathcal{Z})$

$$f = \frac{q}{\beta} + \frac{1}{2\beta} r_0 \phi_0^2 + \frac{1}{\beta} u_0 \phi_0^4 - \frac{h_0}{\beta} \phi_0 \quad . \quad (1.55)$$

Dabei stammt die Konstante  $q$  aus der Integration (1.51) mit (1.54) und dem oben erwähnten Vorfaktor  $Q$ . Wegen  $F = U - TS$  ist  $q$  offenbar bis auf den Boltzmann-Faktor  $k_B$  die Entropie. Man kann die hier beschriebene Näherung daher auch so verstehen, daß angenommen werde, das Minimum der freien Energie falle mit dem Minimum der inneren Energie zusammen.

Aus (1.55) lassen sich nun alle anderen thermodynamischen Größen ableiten.  $\phi_0$  läßt sich dabei aus der Bedingung herleiten, (1.54) zu minimieren, also

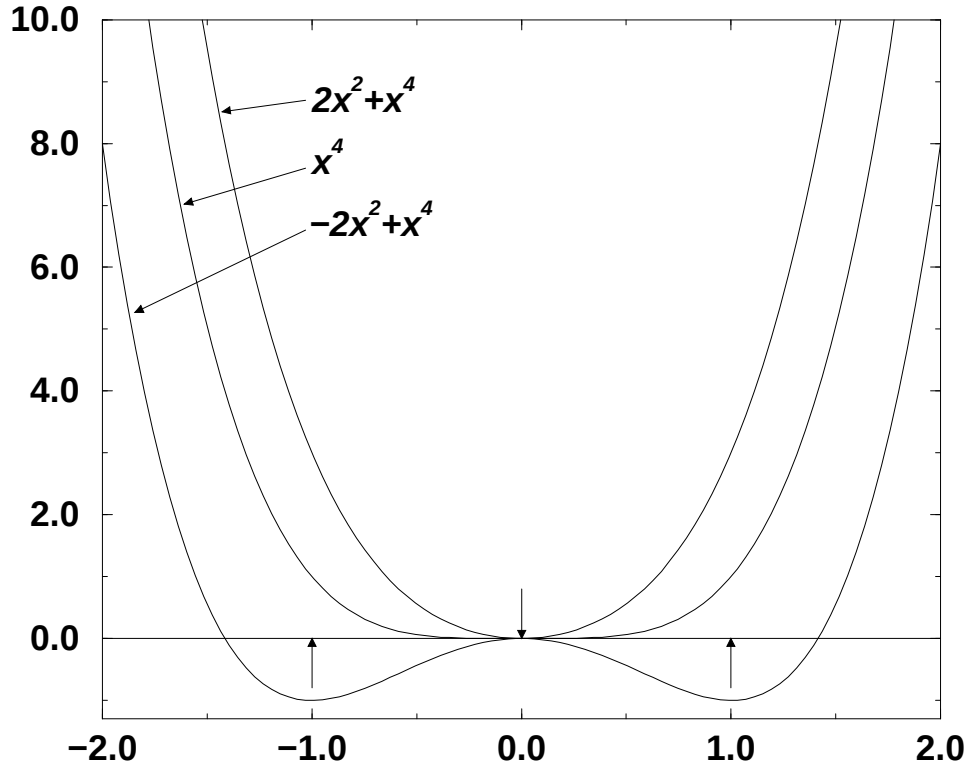
$$r_0 \phi_0 + 4u_0 \phi_0^3 - h_0 = 0 \quad . \quad (1.56)$$

Setzt man  $h_0 = 0$ , so ergeben sich zwei Lösungen, wie in Abb. 1.6 dargestellt:

$$\phi_0 = \frac{1}{2} \sqrt{\frac{-r_0}{u_0}} \quad \text{für } r_0 \leq 0 \quad (1.57)$$

$$\phi_0 = 0 \quad \text{sonst} \quad . \quad (1.58)$$

Wegen  $r_0 = \beta t = \frac{T-T_c}{T_c} = \beta_c - \beta$  existiert eine nicht-triviale Lösung nur für  $\beta > \beta_c$ , also in der Tieftemperaturphase. Der Ordnungsparameter  $\phi_0$  ist dort  $\phi_0 \propto \sqrt{\beta - \beta_c}$ , also ergibt sich der kritische Exponent  $\beta = 1/2$ . Sein Verlauf in Abhängigkeit von der Temperatur ist unter anderem in Abb. 1.8 dargestellt. Auch  $\delta$  findet sich leicht, denn am kritischen Punkt ist  $r_0 = 0$  und das Minimum liegt dann bei  $\phi_0^3 = h_0 = \beta H$  und daher  $\delta = 3$ .  $\alpha$  und  $\gamma$



**Abbildung 1.6:** In der *Landau*-Theorie ergeben sich nur für  $r_0 < 0$  nicht-triviale Lösungen; gezeigt ist der Funktionsverlauf von (1.54) für  $h_0 = 0$  und  $V = 1$  mit  $r_0 = -2$ ,  $r_0 = 0$  und  $r_0 = 2$ . Die gesuchten Minima (1.56) sind jeweils mit Pfeilen gekennzeichnet.

ergeben sich zu  $\gamma = 1$  und  $\alpha = 0$ . Damit reproduziert die *Landau*-Theorie die Ergebnisse der Mean-Field-Näherung. Die beiden übrigen Exponenten,  $\eta$  und  $\nu$ , ergeben sich aus der Theorie nicht direkt, da wegen  $\nabla\phi \equiv 0$  alle Korrelationen verschwinden.

Mit der Annahme, die *Landau*-Theorie sei richtig, solange die Fluktuationen klein sind, läßt sich ihr Gültigkeitsbereich abschätzen: Gleichung (1.32) gibt  $\chi = \beta\widetilde{G}_c(0)$  an, das man mit  $\chi \approx \beta G_c(0)\xi^d$  abschätzen kann, indem man annimmt es gäbe exakt in einem endlichen Volumen, dessen Ausdehnung proportional zur Korrelationslänge  $\xi$  sei, ein nicht verschwindendes  $G_c(0)$ . Diese Annahme steht natürlich im Widerspruch zu  $\nabla\phi \equiv 0$ , das ein räumlich konstantes  $G_c(\mathbf{r})$  erzwingt. Durch Ableitung von (1.56) nach  $H$  findet man  $\chi = -\beta/(2r_0)$  in LTP. Damit ergibt sich die Abschätzung  $G_c(0) \approx -1/(2r_0\xi^d)$ . In der MF-Theorie ist  $\xi \propto t^{-1/2}$  bzw. mit

$$T - T_c = (\beta_c - \beta)TT_c = r_0TT_c \quad (1.59)$$

$\xi \propto r_0^-(1/2)$ . Damit wird  $G_c(0) \approx -1/(2qr_o^{1-d/2})$  mit einem Faktor  $q$ , der von  $\xi$  stammt. Fordert man nun geringe Fluktuationen, also  $G_c(0) \ll \phi_0^2$ , dann ergibt sich mit (1.57) das **Ginzburg-Kriterium**

$$|T - T_c|^{\frac{4-d}{2}} \gg \frac{2u_0}{q} \quad (1.60)$$

Diese Bedingung, das **Ginzburg-Kriterium**, ist in der Nähe von  $T_c$  um so besser erfüllt, je größer  $d$  ist, insbesondere muß, wie zu erwarten war,  $d > d_c = 4$  sein.

### *Landau-Theorie mit $\phi^6$ -Term*

Mit etwas „handwaving“ läßt sich die *Landau*-Theorie erweitern. Die Ergebnisse seien hier nur der Ästhetik halber dargestellt und spielen für diese Arbeit keine weitere Rolle. *Landau* hat seine Theorie als Entwicklung im Ordnungsparameter angesetzt [44, 45]. Die Erweiterung

$$\int d^d \mathbf{x} \mathcal{H}_{LG}(\phi_0) = V \left( \frac{1}{2} r_0 \phi_0^2 + u_0 \phi_0^4 + u_1 \phi_0^6 - h_0 \phi_0 \right) \quad (1.61)$$

mit einem zusätzlichen  $\phi_0^6$ -Term ist also ganz natürlich. Selbstverständlich sollte man erwarten, daß sich für ausreichend kleine  $u_1$  die oben genannten Ergebnisse reproduzieren lassen. Minimiert man (1.61) bei  $h_0$ , so findet man leicht

$$\phi_0^2 = \frac{u_0}{3u_1} \left( \sqrt{1 - \frac{3}{2} \frac{r_0 u_1}{u_0^2}} - 1 \right) \quad (1.62)$$

Da die rechte Seite positiv sein muß, muß die Wurzel größer als 1 sein und daher  $r_0 < 0$ . Bei ausreichend kleinen  $|u_1 r_0|$  kann man entwickeln und es wird dann tatsächlich wieder  $\phi_0^2 = -\frac{r_0}{4u_0}$ . Wirklich interessant wird dieser erweiterte Ansatz daher auch erst bei größeren  $u_1$ .

Verswindet der  $\phi^4$ -Term, also  $u_0 = 0$ , dann wird bei  $h_0 = 0$

$$\phi_0 = \left( \frac{-r_0}{6 u_1} \right)^{1/4} \quad (1.63)$$

also  $\beta = 1/4$ . Setzt man diese Lösung wieder in die zu (1.55) analoge Gleichung für die Freie Energie ein, findet man als geringste Potenz in  $r_0$  wegen  $u_0 = 0$  ein  $r_0^{3/2}$ -Term und der Exponent der zweiten Ableitung der Freien Energie nach der Temperatur liefert sofort  $\alpha = 1/2$ . Der Exponent  $\delta = 5$  ergibt sich bei  $r_0 = 0$  durch  $r_0 \phi_0 + 6u_1 \phi_0^5 - h_0 = 0$ , der Exponent  $\gamma = 1$  nach Ableiten dieser Gleichung.<sup>2</sup>

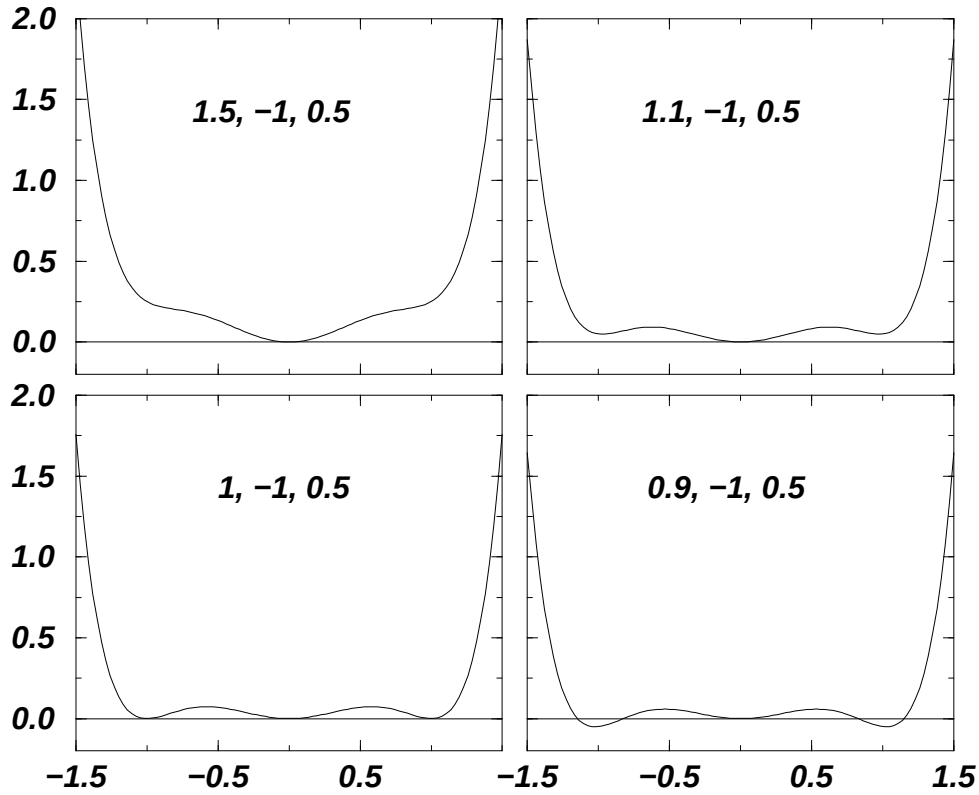
Auf die verallgemeinerte Behandlung einer größten nicht verschwindenden Potenz  $\phi_0^p$  und welche Form dann die Exponenten annehmen, etwa  $\beta = 1/(p-2)$ , soll hier verzichtet werden. Um das Bild zu vervollständigen, soll jedoch der Fall  $u_0 < 0$  untersucht werden. Es ist klar, daß der Koeffizient der höchsten Potenz in  $\phi$  positiv sein muß, andernfalls würden sich beim Minimieren nur lokale Minima finden lassen. Jedoch unterliegen alle anderen Potenzen nicht dieser Beschränkung. Mit Einführung eines  $u_1 > 0$  ist also ein  $u_0 < 0$  zulässig. Aus (1.62) liest man die Lösung

$$\phi_0^2 = \frac{-u_0}{3u_1} \left( \sqrt{1 - \frac{3}{2} \frac{r_0 u_1}{u_0^2}} + 1 \right) \quad (1.64)$$

ab. Selbstverständlich kommt nach wie vor auch die triviale Lösung in Frage. Anders als bisher, kommt die Lösung (1.64) jedoch schon bei allen  $r_0 \leq \frac{2u_0^2}{3u_1}$  in Betracht. Und tatsächlich findet man bei genauerem Hinsehen, also durch Vergleich des trivialen und des nicht-trivialen Minimums, die Bedingung

$$r_0 \leq \frac{u_0^2}{2u_1} \quad (1.65)$$

An (1.64) liest man ab, daß an dieser Stelle ein *Sprung* im Ordnungsparameter auftreten wird. Ein Sprung bedeutet jedoch einen Phasenübergang *erster* Ordnung.



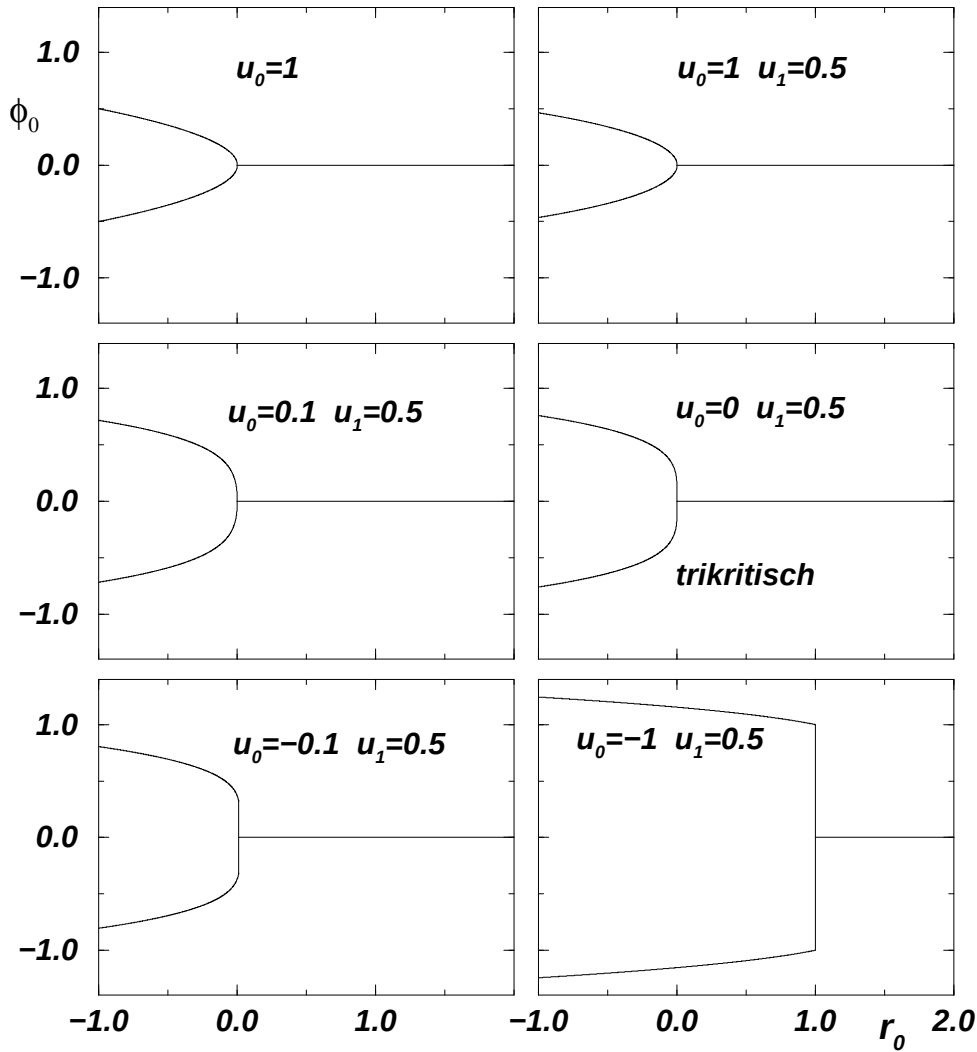
**Abbildung 1.7:** Plot des Funktionsverlaufes von  $\frac{1}{2}r_0\phi_0^2 + u_0\phi_0^4 + u_1\phi_0^6$  für vier verschiedene Parametersätze  $(r_0, u_0, u_1)$ . Bei  $u_0 < 0$  tritt bei  $r_0 > 0$  und damit in der ursprünglichen Hochtemperaturphase zum ersten Mal die nichttriviale Lösung (1.64) auf. Sie verursacht einen Sprung im Ordnungsparameter, s. Abb. 1.8 untere Zeile.

In Abb. 1.7 ist der Funktionsverlauf von (1.61) für verschiedene Parametersätze  $(r_0, u_0, u_1)$  dargestellt. Der Sprung in  $\phi_0$  beim ersten Auftreten der nichttrivialen Lösung (1.64) ist im unteren linken Bild zu sehen. Damit schließt sich das Bild:

- $u_0 > 0$  produziert auch in Anwesenheit eines  $\phi^6$ -Terms einen Phasenübergang zweiter Ordnung mit MF-artigen Exponenten:  $\alpha = 0$ ,  $\beta = 1/2$ ,  $\gamma = 1$ ,  $\delta = 3$ . Der Ordnungsparameter ist stetig (s. Abb. 1.8 oben rechts und Mitte links).
- $u_0 = 0$  zeigt ebenfalls einen Phasenübergang zweiter Ordnung, jedoch mit Exponenten, die vom MF-Verhalten abweichen:  $\alpha = 1/2$ ,  $\beta = 1/4$ ,  $\gamma = 1$ ,  $\delta = 5$ . Der Ordnungsparameter ist stetig (s. Abb. 1.8 Mitte rechts).
- $u_0 < 0$  zeigt einen Phasenübergang erster Ordnung. Der Ordnungsparameter hat einen Sprung bei  $r_0 = u_0^2/(2u_1)$  (s. Abb. 1.8 untere Zeile).

Den Punkt  $u_0 = 0$  bezeichnet man auch als **trikritischen** Punkt [13], er bezeichnet diejenige Stelle im Parameterraum, an dem der Phasenübergang seine Ordnung wechselt.

<sup>2</sup>Der Leser sehe dem Autor an dieser Stelle bitte die Marginalie nach, daß trotz der Perspektive, die ein  $\phi^{16}$ -Term hinsichtlich des *Ising*-Modells bietet, keine Ambitionen bestehen, hier auch diesen noch einzuführen.



**Abbildung 1.8:** Der Verlauf des Ordnungsparameters für verschiedene Parametersätze. Oben links ist die ursprüngliche *Landau*-Theorie ohne  $\phi^6$ -Term zu sehen, oben rechts ist ein  $\phi^6$ -Term hinzugefügt, jedoch spielt er am Phasenübergang keine Rolle. Mitte rechts zeigt den trikritischen Punkt mit  $u_0 = 0$ , in der unteren Zeile verschieden starke Phasenübergänge erster Ordnung.

### 1.3.2 Gauß-Modell

In diesem Modell wird die Wirkungsichte (1.50) vereinfacht, indem der  $\phi^4$ -Term entfernt wird, also  $u_0 = 0$ :

$$\mathcal{H}_G(\mathbf{x}) = \frac{1}{2}c[\nabla\phi(\mathbf{x})]^2 + \frac{1}{2}r_0\phi^2(\mathbf{x}) + \mathbf{h}(\mathbf{x})\phi(\mathbf{x}) \quad . \quad (1.66)$$

Dafür bleibt im Gegensatz zur *Landau*-Theorie der  $\nabla\phi$ -Term erhalten. Das Feld  $\phi$  unterliegt dabei der Einschränkung, eine Fouriertransformierte zu sein, also

$$\phi(\mathbf{x}) = \int \frac{d^d\mathbf{k}}{(2\pi)^d} e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}} \tilde{\phi}(\mathbf{k}) \quad . \quad (1.67)$$

Das Funktionalintegral (1.51) läßt sich dann vereinfachen:

$$\mathcal{Z}_G(\tilde{\mathbf{h}}) = \mathcal{Z}_G(0) \exp \left[ \frac{1}{2} \int^\Lambda \frac{d^d \mathbf{k}}{(2\pi)^d} \frac{\tilde{\mathbf{h}}(\mathbf{k}) \tilde{\mathbf{h}}(-\mathbf{k})}{c k^2 + r_0} \right] \quad (1.68)$$

$$\text{mit } \mathcal{Z}_G(0) = \exp \left[ -\frac{1}{2} V \int^\Lambda \ln(c k^2 + r_0) \right] , \quad (1.69)$$

wobei  $\tilde{\mathbf{h}}(\mathbf{k})$  die Fouriertransformierte von  $\mathbf{h}(\mathbf{k})$  bezeichnet. Hierbei wurde der *cutoff*  $\Lambda$  verwendet, der die Integration im k-Raum auf den physikalischen Bereich beschränkt, in dem die Gitter-Struktur noch erhalten ist, d.h.  $\Lambda$  liegt in der Größenordnung  $2\pi/a$  mit  $a$  der Gitterkonstanten.

Das Integral in (1.68) läßt sich umschreiben und man erhält mit

$$\Delta(\mathbf{x} - \mathbf{y}) = \int^\Lambda \frac{d^d \mathbf{k}}{(2\pi)^d} \frac{e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{x}}}{c k^2 + r_0}, \quad (1.70)$$

dem **bare propagator** des *Gauß*-Modells, den Ausdruck

$$\int^\Lambda \frac{d^d \mathbf{k}}{(2\pi)^d} \frac{\tilde{\mathbf{h}}(\mathbf{k}) \tilde{\mathbf{h}}(-\mathbf{k})}{c k^2 + r_0} = \int d^d \mathbf{x} d^d \mathbf{y} \mathbf{h}(\mathbf{x}) \Delta(\mathbf{x} - \mathbf{y}) \mathbf{h}(\mathbf{y}) . \quad (1.71)$$

Der bare propagator ist gleichzeitig die verbundene Zweipunkt-Korrelationsfunktion des *Gauß*-Modells. Integriert man (1.70) im gesamten k-Raum für drei Dimensionen, erhält man  $\Delta \propto e^{-r\sqrt{r_0/c}}/(cr)$ . Am kritischen Punkt, also bei  $r_0 = 0$  ergibt sich damit  $\eta = 0$  und bei  $r_0 \neq 0$  für die Korrelationslänge  $\xi \propto r_0^{-1/2}$ , also  $\nu = 1/2$  [13]. Diese Exponenten sind einmal mehr die der MF-Theorie.

Für  $r_0 < 0$ , also  $T < T_c$  ist (1.66) beliebig klein und das Integral (1.51) wächst über alle Grenzen; das *Gauß*-Modell ist daher in seiner Tieftemperaturphase nicht definiert [13].

### Entwicklung des *Landau-Ginzburg*-Hamiltonian

Das *Gauß*-Modell kann dazu verwendet werden, den vollständigen *Landau-Ginzburg*-Hamiltonian (1.51) zu entwickeln. Dazu wird der  $\phi^4$  für kleine  $\lambda$  entwickelt [8]:

$$\mathcal{Z}_{LG} = \int \mathcal{D}\phi e^{-\int d^d \mathbf{x} \mathcal{H}_{LG}(\mathbf{x})} \quad (1.72)$$

$$= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \int \mathcal{D}\phi e^{-\mathcal{H}_G} \left[ \left( -u_0 \int d^d \mathbf{z} \phi^4(\mathbf{z}) \right)^n \right] \quad (1.73)$$

$$= \mathcal{Z}_G \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \left\langle \left( -u_0 \int d^d \mathbf{z} \phi^4(\mathbf{z}) \right)^n \right\rangle_G , \quad (1.74)$$

wobei  $\langle \dots \rangle_G$  die Bildung des Erwartungswertes in einem *Gauß*'schen Funktionalintegral, also mit  $e^{-\mathcal{H}_G}$  als „Boltzmann-Faktor“, bedeutet. Jedoch zeigt sich, daß diese Reihe bestenfalls asymptotisch ist, also zwar nicht konvergiert jedoch ihre relative Abweichung von der richtigen Lösung für jede endliche Zahl von Termen mit ausreichend kleinem  $u_0$  beliebig klein gemacht werden kann. Um  $\mathcal{Z}_{LG}$  in dieser Form berechnen zu können, wird es zunächst noch einmal umgeschrieben,

$$\mathcal{Z}_{LG} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \left( -u_0 \int d^d \mathbf{z} \frac{\delta^4}{\delta \mathbf{J}^4(\mathbf{z})} \right)^n \mathcal{Z}_G \quad (1.75)$$

$$= \exp \left( -u_0 \int d^d \mathbf{z} \frac{\delta^4}{\delta \mathbf{J}^4(\mathbf{z})} \right) \mathcal{Z}_G , \quad (1.76)$$

wobei hier das Funktionaldifferential  $\frac{1}{\mathcal{Z}_G} \frac{\delta^4}{\delta \mathbf{J}^4} \mathcal{Z}_G = \langle \phi^4 \rangle_G$  verwendet wurde.

An dieser Stelle beginnt die diagrammatische Entwicklung mit Feynman-Graphen. Ihre Darstellung würde den Rahmen dieses Kapitels sprengen.

## 1.4 Renormierungsgruppe

Die Renormierungsgruppe stellt methodisch den allgemeinsten und erfolgreichsten analytischen Ansatz dar, kritische Phänomene zu studieren. Es handelt sich nicht um eine einzige Methode, sondern vielmehr um das Konzept [39], ein Problem neu zu parametrisieren, ohne die physikalisch relevanten Größen anzutasten und dabei *Freiheitsgrade auf kleinen Skalen zu vergrößern*. Denn es sind die großen Skalen, die das Verhalten des Systems diktieren, wenn die Korrelationslänge am Phasenübergang divergiert.

Der Begriff „Gruppe“ ist etwas irreführend, denn die Renormierungsgruppe ist zumindest im Falle von  $\phi^4$ -Theorie lediglich eine Halbgruppe [46]. Daneben steht die Tatsache, eine Gruppe oder eine Halbgruppe zu sein, bei der praktischen Benutzung der Methode nicht im Zentrum des Interesses [39], auch nicht in der Quantenfeldtheorie, wo die Renormierungsgruppe zur Lösung identischer Probleme [47] ebenfalls intensiv verwendet wird.

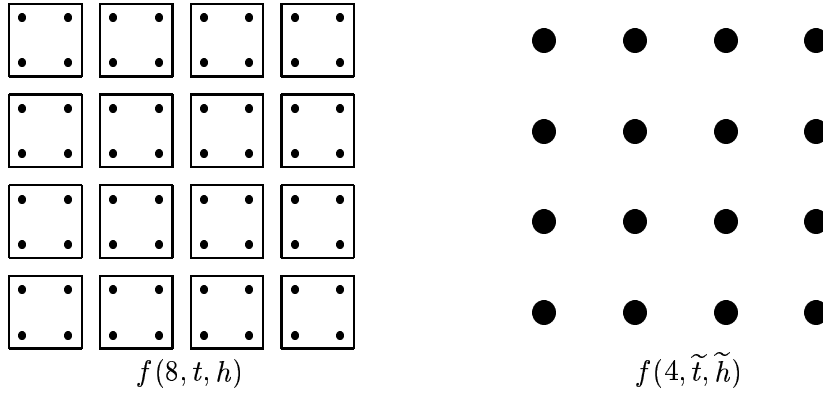
Im folgenden werden in aller gebotenen Kürze die der Renormierungsgruppe zugrundeliegenden Ideen dargestellt. Sie spielt in der Motivation der vorliegenden Arbeit insofern eine Rolle, als daß die Ergebnisse numerischer Untersuchungen frustrierter Systeme nicht immer im Einklang mit den Ergebnissen der Renormierungsgruppe stehen und sich daher die Frage stellt, ob und wenn ja, welche der beiden Methoden ihre Gültigkeit im Falle frustrierter Systeme verliert.

### 1.4.1 Realspace-Renormierung

Die Realspace-Renormierung wurde erstmals von *Kadanoff* [48] angegeben (wenngleich nicht unter diesem Namen) und sie ist auch heute noch unter dem Namen **Kadanoff-Blockspin-Konstruktion** [10] oder -Transformation [45] bekannt. Die Realspace-Renormierung steht im Gegensatz zur Renormierung im  $k$ -Raum [49, 50]. Das beiden zugrundeliegende Prinzip ist, daß mikroskopischen Eigenschaften der Wechselwirkung im Gitter am Phasenübergang keine Rolle mehr spielen. Im Ortsraum sollte es daher möglich sein, ganze Blöcke von Spins zu einem einzelnen neuen **Blockspin** zusammenzufassen. Auch im Falle einer endlichen Korrelationslänge, also bei  $T \neq T_c$  sollte dies möglich bleiben, solange die Blockgröße deutlich unter der Korrelationslänge bleibt. Das „geblockte“ System verhält sich thermodynamisch wie das alte, denn es repräsentiert das alte System nur in neuer Form. Entsprechend sind die Werte der freien Energie und der Zustandssumme sowie alle Ableitungen gleich. Jedoch unterscheiden sich Funktionen der Blockvariablen in ihrer Darstellung sicherlich von der Darstellung mit ungeblockten Spinvariablen. Ziel ist es nun, die Funktionen trotz geblockter Variablen auf die gleiche Form wie die der ungeblockten Variablen zu bringen, indem man die äußeren (feldartigen) Parameter  $t$  und  $h$  transformiert, ggf. indem man bestimmte Wechselwirkungen, deren Irrelevanz bereits bekannt ist, tatsächlich ignoriert. Ist das betrachtete System unendlich ausgedehnt, läßt sich diese Prozedur dann beliebig oft wiederholen.

#### **Kadanoff-Blockspins**

In Abb. 1.9 ist die Idee der *Kadanoff-Blockspin-Konstruktion* schematisch dargestellt. Wenn die Form der Freien Energie im geblockten System der Form in der ungeblockten Formulierung entspricht, indem einfach die Temperatur und äußeres Feld renormiert



**Abbildung 1.9:** In der *Kadanoff*-Blockspin-Konstruktion wird jeweils eine Gruppe von Spins zu einem neuen Spin zusammengefaßt. Die Zustandsumme bzw. die Freie Energie des geblockten System ist in aller Regel komplizierter als die des ungeblockten. Ziel ist es, den neuen Ausdruck auf die gleiche Form zu bringen wie den alten, indem die Parameter renormiert werden.

werden, kann man das für den konkreten Fall lesen als: „Ein  $4 \times 4$ -Blockspin-System als geblockte Formulierung eines  $8 \times 8$ -Normalspin-System bei Temperatur  $t$  und äußerem Feld  $h$ , verhält sich genauso wie ein  $4 \times 4$ -Normalspin-System bei Temperatur  $\tilde{t}$  und Feld  $\tilde{h}$ .“

In seinem Artikel [48] beschreibt *Kadanoff* seine Transformation, um die von *Widom* zuvor publizierte Skalenhypothese [37, 38] zu untermauern. Im folgenden eine grobe Skizze des Artikels [48].

Die Kantenlänge eines Spin-Blockes  $\alpha$  sei  $L \ll \xi$ . Auf Grund ihrer endlichen Größe bleibt die Zustandsumme eines solchen isolierten Blockes jedenfalls analytisch und ihre freie Energie läßt sich in  $t$  entwickeln:

$$f_L(t, h) = f_L^{(0)}(t, h) + t f_L^{(1)}(t, h) + \frac{t^2}{2} f_L^{(2)}(t, h) + \dots \quad (1.77)$$

Die Wechselwirkungen mit einem äußeren Feld ist für den Block gerade  $h \sum_{\mathbf{r} \in \alpha} \sigma_{\mathbf{r}}$ . Diese Summe definiert die mittlere Magnetisierung im Block  $\langle \sigma \rangle_L$ :

$$\sum_{\mathbf{r} \in \alpha} \sigma_{\mathbf{r}} = \mu_{\alpha} \langle \sigma \rangle_L L^d, \quad (1.78)$$

wobei  $\mu_{\alpha}$  die Rolle der neuen Spin-Variablen übernimmt.

Nun wird angenommen, die Wechselwirkung des Systems von Blockspins sei bis auf eine additive Größe  $f_{int}$  von derselben Form wie die des ursprünglichen Systems, jedoch mit neuen Kopplungen  $\tilde{h}$  und  $\tilde{t}$ . Dies würde zur gesamten Freien Energie den Term

$$f_{int}(\tilde{t}, L) + f(\tilde{t}, \tilde{h}) \quad (1.79)$$

beitragen. Die neue Kopplungen  $\tilde{h}$  ist wegen (1.78)

$$\tilde{h}(h, L) = h \langle \sigma \rangle_L L^d. \quad (1.80)$$

Die Freie Energie ist dann „umgelegt“ auf einen Spin

$$f(t, h) = f_L(t, h) + L^{-d} f_{int}(\tilde{t}, L) + L^{-d} f(\tilde{t}, \tilde{h}). \quad (1.81)$$

$f_L(t, h)$  ist wie bereits erwähnt regulär. Nimmt man zusätzlich an, daß auch  $f_{int}$  regulär ist, dann lassen sich die Singularitäten von  $f$  bei  $h = 0$  für kleine  $t$  so schreiben:

$$f(t, h) = f_0 + tf_1 + t^{2-\alpha}f_2 + \dots \quad (1.82)$$

$$= L^{-d}(f_0 + \tilde{t}f_1 + \tilde{t}^{2-\alpha}f_2 + \dots) \quad (1.83)$$

und daher  $\tilde{t} = tL^{d/(2-\alpha)}$ . Mit (1.78) läßt sich auch die Zweipunktkorrelationsfunktion  $\Gamma(t, r)$  in neuen Variablen schreiben. Man erhält

$$\Gamma(t, r) = \langle \sigma \rangle_L^2 \Gamma(\tilde{t}, r/L) \quad . \quad (1.84)$$

Mit der Wahl  $L^{\frac{d}{2-\alpha}} = t^{-1}$  ergibt sich

$$\Gamma(t, r) = \langle \sigma \rangle_L^2 \Gamma(1, rt^{\frac{2-\alpha}{d}}) \quad (1.85)$$

und mit  $\xi \propto t^{-\nu}$  daraus das Skalengesetz (1.42)  $\nu d = 2 - \alpha$ . Mit der Wahl  $L = r$  bei  $t = 0$  findet man

$$\langle \sigma \rangle_L = L^{-\frac{d-2+\eta}{2}} \quad (1.86)$$

und daher mit (1.80)

$$\tilde{h}(h, L) = hL^{\frac{d+2-\eta}{2}} \quad . \quad (1.87)$$

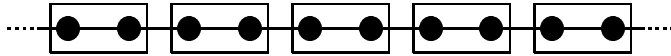
Damit ist der singuläre Teil der freien Energie als verallgemeinerte homogene Funktion ausgedrückt, wie es in (1.34) benötigt wurde:

$$f_{sing}(t, h) = L^{-d} f(tL^{d/(2-\alpha)}, hL^{\frac{d+2-\eta}{2}}) \quad . \quad (1.88)$$

Die Blockspin-Konstruktion bietet daher einen direkten Zugang zur Annahme einer verallgemeinerten homogenen Funktion für die Freie Energie.

### **Kadanoff-Blockspins in der Spinkette**

Die soeben allgemein besprochene *Kadanoff*-Blockspin-Transformation läßt sich recht einfach auf die *Ising*-Spinkette anwenden [25, 39], wie in Abb. 1.10 dargestellt. Im Vordergrund sollen nun jedoch nicht Skalengesetze oder die konkreten Exponenten stehen - die Spinkette ordnet bekanntlich nicht bei endlichen Temperaturen. Im Vordergrund soll nun die Frage stehen, wie Temperatur und äußeres Feld beim Übergang zum Blockspin renormiert werden müssen. Der Hamiltonian der periodisch geschlossenen *Ising*-Spinkette, d.h



**Abbildung 1.10:** Die geblockte periodische geschlossene *Ising*-Spinkette ist das einfachste Beispiel der Blockspin-Transformation.

also eigentlich eines *Ising*-Rings, hat die gewohnte Form (1.22):

$$\mathcal{H} = -J \sum_{i.nn.j} s_i s_j - H \sum_i s_i \quad . \quad (1.89)$$

Jedes Spin-Paar oder jeder bond trägt zur Energie

$$\mathcal{H}_{ij} = -J s_i s_j - \frac{1}{2} H (s_i + s_j) \quad (1.90)$$

bei. Besteht der Ring aus  $N$  Spins, so läßt sich die Zustandssumme als Spur der  $N$ ten Potenz ihrer sog. Transfermatrix  $T$  schreiben:

$$\mathcal{Z} = \text{Tr } T^N \quad . \quad (1.91)$$

Die Transfermatrix-Methode [51, 52, 42] soll hier nicht näher erläutert werden. Mit einem Hamiltonian der Form (1.90) läßt sie sich wie folgt ausschreiben:

$$T = \begin{pmatrix} e^{\beta(J+H)} & e^{-\beta J} \\ e^{-\beta J} & e^{\beta(J-H)} \end{pmatrix} \quad . \quad (1.92)$$

Um die Spins nun paarweise zu blocken, muß die Zustandssumme für je ein Paar ausgerechnet werden. Wenn  $T'$  die Transfermatrix des geblockten Systems ist, muß offenbar  $T' = T^2$  sein, denn es ist  $\mathcal{Z} = \text{Tr } T^N = \text{Tr } (T^2)^{(N/2)}$ .

Setzt man  $e^{-\beta J} = u$  und  $e^{-\beta h} = v$ , also

$$T = \begin{pmatrix} \frac{1}{uv} & u \\ u & \frac{v}{u} \end{pmatrix} \quad , \quad (1.93)$$

findet man für das Quadrat  $T^2$

$$T^2 = \begin{pmatrix} u^2 + \frac{1}{u^2 v^2} & v + \frac{1}{\frac{v}{u^2}} \\ v + \frac{1}{v} & u^2 + \frac{v^2}{u^2} \end{pmatrix} \quad . \quad (1.94)$$

Es gilt nun  $u'(u, v)$  und  $v'(u, v)$  so zu wählen, daß sich  $T'(u', v') = T^2(u, v)$  schreiben läßt wie  $T$ , gegebenenfalls mit einem Vorfaktor:

$$T^2(u, v) = q(u, v) T(u'(u, v), v'(u, v)) \quad . \quad (1.95)$$

Die Bestimmungsgleichungen für  $u'$ ,  $v'$  und  $q$  sind dann

$$q \frac{1}{u' v'} = u^2 + \frac{1}{u^2 v^2} \quad (1.96)$$

$$q u' = v + \frac{1}{v} \quad (1.97)$$

$$q \frac{v'}{u'} = \frac{v^2}{u^2} \quad . \quad (1.98)$$

Der Vorfaktor  $q$  ist in der Tat notwendig, sonst gäbe es drei unabhängigen Gleichungen für nur zwei unabhängige Variablen. Als Lösung erhält man drei recht komplizierte Gleichungen für  $q$ ,  $u'$  und  $v'$ . Mit  $e^{-\beta' h'} = v'$  und  $e^{-\beta' J} = u'$  lassen sich aus ihnen sofort neue Feldvariablen  $t'$  und  $h'$  errechnen. Der Vorfaktor  $q$  läßt sich als Verschiebung des Energienullpunktes verstehen, denn der Hamiltonian des *Ising*-Rings ist offenbar einfach

$$\mathcal{H}_N(t, h) = \mathcal{H}_{\frac{N}{2}}(t', h') - \frac{N}{2} \ln(q/\beta) \quad , \quad (1.99)$$

was man durch Verwenden dieses Hamiltonians in der Form (1.90) in (1.92) sofort abliest.

Bei der Berechnung von Erwartungswerten spielt der Vorfaktor keine Rolle. Daher kann man zusammenfassend sagen: „Die thermodynamischen Eigenschaften einer Spinkette mit

$N$  Spins, bei Temperatur  $t$  und äußerem Feld  $h$ , entsprechen denen einer Kette mit  $N/2$  Spins bei Temperatur  $t'$  und äußerem Feld  $h'$ ."

Wenn die Kette, oder vielmehr der Ring, unendlich lang ist, führt der oben dargestellte Renormierungsschritt auf das ursprünglich betrachtete System zurück. Die Renormierung läßt sich dann beliebig oft anwenden und es läßt sich das Verhalten der Transformationsgleichungen unter Iteration beobachten. Eine wesentliche Rolle spielen dabei die Fixpunkte oder **fixed points** der Transformation. Wenn die Transformation einen Punkt auf sich selbst abbildet, bedeutet das, daß sich die thermodynamischen Eigenschaften nicht ändern, wenn man die Längenskala vergrößert, mit anderen Worten: Das Verhalten ist auf allen Skalen dasselbe. Diese Eigenschaft ist jedoch dasjenige, das man bei divergierender Korrelationslänge, also insbesondere am Phasenübergang erwartet.

Eine Variante der Realspace-Renormierung ist die *Migdal-Kadanoff*-Methode [53, 54], eine Methode die sich ebenfalls der sog. **Dezimation** bedient. Sie ist auch heute noch im Gebrauch [55], auch wenn bekannt ist, daß Realspace-Renormierung im allgemeinen zu schlechteren Ergebnissen führt als die in 1.4.2 angerissene  $\phi^4$ -Theorie.

### Formale Definition der Blockspin-Transformation

Einen etwas formaleren Zugang zur Blockspin-Transformation für *Ising*-Systeme bietet folgender Ansatz [39]:

Das System wird in Blöcke unterteilt, wobei die Mengen  $\mathbb{B}_i$  die Indizes der im Block  $i$  enthalten  $n$  *Ising*-Spins  $s_j$  mit  $j \in \mathbb{B}_i$  enthalten. Dann läßt sich für ungerade  $n$  eine Transformation  $T$  angeben mit

$$T(s'_i; s_{j_1}, s_{j_2}, \dots, s_{j_n} \mid j_1, j_2, \dots, j_n \in \mathbb{B}_i) \begin{cases} 1, & \text{wenn } s'_i \sum_k^n s_{j_k} > 0 \\ 0 & \text{sonst} \end{cases} . \quad (1.100)$$

Die  $s'_i$  bezeichnen dabei die neuen Blockspins. Die Transformation  $T$  ist offenbar genau dann 1, wenn die Mehrheit der Spins die Konfiguration  $s'_i$  hat.

Der neue reduzierte Hamiltonian  $\mathcal{H}'$ , der bereits den Vorfaktor  $\beta'$  enthalten soll, sei definiert durch

$$e^{-\mathcal{H}'(\mathbf{s}')} = \text{Tr}_{\mathbf{s}} \prod_i T(s'_i; s_{j_1}, s_{j_2}, \dots, s_{j_n} \mid j_1, j_2, \dots, j_n \in \mathbb{B}_i) e^{-\mathcal{H}(\mathbf{s})} , \quad (1.101)$$

wobei der Vektor  $\mathbf{s}'$  die Konfiguration der Blockspins darstellt und  $\mathbf{s}$  die Konfiguration im ursprünglichen Modell. Das Produkt läuft über alle Blöcke und sorgt dafür, daß der rechte Hamiltonian nur dann beiträgt, wenn  $\mathbf{s}'$  eine gültige Darstellung der globalen Konfiguration im Sinne des oben genannten Majoritäts-Prinzips ist. Für jeden Block gibt es nur eine richtige Darstellung in diesem Sinne und es ist daher die Summe über alle Konfigurationen

$$\sum_{s'_i \in \{-1, 1\}} T(s'_i; s_{j_1}, s_{j_2}, \dots, s_{j_n} \mid j_1, j_2, \dots, j_n \in \mathbb{B}_i) = 1 . \quad (1.102)$$

Damit läßt sich (1.101) umformen und man erhält

$$\text{Tr}_{\mathbf{s}'} e^{-\mathcal{H}'(\mathbf{s}')} = \text{Tr}_{\mathbf{s}} e^{-\mathcal{H}(\mathbf{s})} , \quad (1.103)$$

was nichts anderes bedeutet, als daß in der oben dargestellten Transformation die Zustandssumme erhalten ist.

### 1.4.2 Renormierungsfluß

Sind die Transformationsgleichungen gegeben, dann läßt sich die Bewegung eines gegebenen Satzes von Parametern im Parameterraum angeben und untersuchen. Um einen Fixpunkt herum lassen sich die Transformationen entwickeln. Um die Darstellung zu vereinfachen werden die betrachteten Parameter in einem Vektor  $\mathbf{K}$  dargestellt,

$$\mathbf{K} = (u, v, w_1, \dots) \quad , \quad (1.104)$$

wobei  $u, v, w_1, \dots$  irgendwelche Parameter des Hamiltonian bezeichnen. Für  $\mathbf{K}'$ , der die Parameter nach einem Renormierungsschritt darstellt, ist dann in erster Ordnung

$$\mathbf{K}' \approx \mathbf{K}^* + T_{ab}(\mathbf{K} - \mathbf{K}^*) \quad (1.105)$$

mit einer Matrix  $T_{ab} = \frac{\partial K'_a}{\partial K_b}(\mathbf{K}^*)$ , also die Ableitung des transformierten Parameters  $K'_a$  nach dem ursprünglichen Parameter  $K_b$ , ausgewertet am Fixpunkt  $\mathbf{K}^*$ . Die linken Eigenvektoren der Matrix seien  $\mathbf{e}_i$ , die Eigenwerte  $\lambda_i$ , also  $\mathbf{e}_i T = \lambda_i \mathbf{e}_i$ . Im folgenden soll angenommen werden, die Eigenwerte  $\lambda_i$  seien reell und positiv. Die Projektionen von  $(\mathbf{K} - \mathbf{K}^*)$  auf die  $\mathbf{e}_i$  seien  $u_i = \mathbf{e}_i(\mathbf{K} - \mathbf{K}^*)$ , dann sind entsprechend die transformierten Projektionen mit (1.105)

$$\begin{aligned} u'_i &= \mathbf{e}_i(\mathbf{K}' - \mathbf{K}^*) \\ &= \mathbf{e}_i T_{ab}(\mathbf{K} - \mathbf{K}^*) \\ &= \lambda_i \mathbf{e}_i(\mathbf{K} - \mathbf{K}^*) \\ &= \lambda_i u_i \quad . \end{aligned}$$

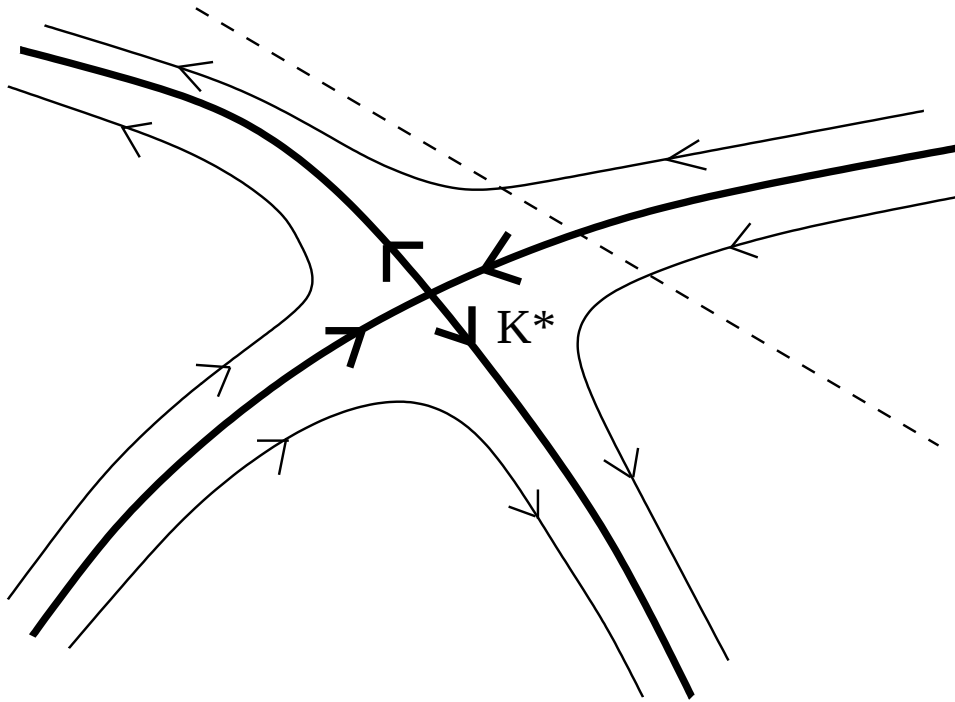
Drückt man die vorhandenen Parameter also durch ihre Projektionen auf die Eigenvektoren der Transformationsmatrix aus, erhält ein stark vereinfachtes Transformationsverhalten. Die Projektionen heißen **Skalenvariablen** oder **Felder**. Es spielt offenbar eine wesentliche Rolle, ob die Eigenwerte größer als 1, gleich 1 oder kleiner sind, denn im  $m$ ten Renormierungsschritt ist in der Umgebung des kritischen Punktes  $u_i^{(m)} = \lambda_i^m u_i$ . Ist  $\lambda_i > 1$  dann wird die SkalenvARIABLE  $u_i$  also in jedem Renormierungsschritt größer, ist hingegen  $\lambda_i < 1$ , so wird ihr Betrag allmählich kleiner.

Bisher wurde noch nicht erwähnt, welche Rolle die genaue Form der Transformation spielt. Als Beispiel sei die oben genannte Blockspin-Transformation herangezogen: Wenn man statt Blöcken aus je zwei Spins Blöcke aus je vier Spins formt, dann sollte das Transformationsverhalten im wesentlichen dem des zweimaligen Anwendens der Zweier-Blockung entsprechen. Es ist daher sinnvoll, die Eigenwerte, deren  $m$ te Potenzen im  $m$ ten Renormierungsschritt auftreten, als Potenzen des Blockparameters  $b$  aufzufassen,

$$\lambda_i = b^{y_i} \quad . \quad (1.106)$$

Die Unterscheidung in der Größe von  $\lambda_i$  gegen 1 wird damit zur Unterscheidung von  $y_i$  gegen 0:

- $y_i > 0$ : SkalenvARIABLE  $u_i$  und Exponent  $y_i$  sind **relevant**, insofern als daß die Renormierung die SkalenvARIABLE und damit die Distanz zum Fixpunkt allmählich vergrößert.
- $y_i < 0$ : SkalenvARIABLE  $u_i$  und Exponent  $y_i$  sind **irrelevant**, da die SkalenvARIABLE durch entsprechend viele Renormierungsschritte beliebig klein gemacht werden kann.



**Abbildung 1.11:** In der Umgebung um den Fixpunkt lassen sich die Transformationen entwickeln. Mit Kenntnis der Transformationsmatrix lassen sich dann Flußlinien angeben, die die Trajektorien der Parameter-Vektoren anzeigen.

- $y_i = 0$ : Skalenvariable  $u_i$  und Exponent  $y_i$  sind **marginal**.

In Abb. 1.11 (in Anlehnung an [39]), einem **Flußdiagramm**, ist das Beispiel eines zweidimensionalen Parameterraumes abgebildet. Die beiden Eigenvektoren der oben diskutierten Matrix  $T_{ab}$  stehen senkrecht aufeinander und sind bei  $K^*$  eingezeichnet. Die Pfeile zeigen die Trajektorien an, auf denen sich ein Parametersatz durch Renormierung bewegen würde. Im allgemeinen gibt es beliebig viele irrelevante Skalenvariablen. Die Hyperfläche, die ihre Eigenvektoren aufspannen, nennt man **critical surface** oder **kritische Oberfläche**. Jeder Punkt im Parameterraum, der durch das Renormieren zum Fixpunkt gelangen soll, muß sich auf dieser Fläche befinden. Oder negativ formuliert: Ist eine relevante Skalenvariable nicht richtig eingestellt, liegt also ein Punkt nicht auf der kritische Oberfläche, kann er dessen Fixpunkt nicht erreichen. Nimmt man an, in Abb. 1.11 seien alle relevanten Felder dargestellt, so besteht hier die Hyperfläche lediglich aus einer Linie.

Die gestrichelte Linie in Abb. 1.11 stellt die Trajektorie eines Systems dar, bei dem ein physikalischer Parameter wie Temperatur und äußeres Feld oder aber irgendeine andere Größe verändert wird. Dort, wo diese gestrichelte Linie die kritische Oberfläche durchsticht, sagt man, daß System sei kritisch, denn die Renormierung wird seinen Parametersatz auf den Fixpunkt führen. Dort und nicht am Fixpunkt erfährt es seinen Phasenübergang und dort hat es seinen kritischen Punkt.

Es ist wichtig anzumerken, daß es auf die jeweilige Wahl der Werte der Feldvariablen und daher implizit auch auf die Wahl des jeweiligen Modells ankommt, *ob* ein kritischer Punkt, den man für einen bestimmten *breakdown of symmetry* bei einer bestimmtem Raumdimension erwartet, tatsächlich auch erreicht werden kann. Es reicht im allgemeinen nicht, daß ein bestimmter Parametersatz auf der kritischen Oberfläche liegt, denn die oben gemachte Entwicklung der Transformation in erster Ordnung gilt nur in der unmittelbarer

Umgebung des Fixpunktes. Weiter außerhalb kann die Transformation den Punkt anders als erwartet transportieren, die in Abb. 1.11 dargestellten Linien des Flusses können beliebig gekrümmt sein. Dasjenige Gebiet der kritischen Oberfläche, das zum Erreichen des Fixpunktes führt, sein „Einzugsgebiet“ bezeichnet man als *catchment area* [13], *basin of attraction* oder *critical manifold*[45].

Es gibt eine Reihe besonderer Fixpunkte. Den **Gaussian fixed point** nennt man auch **den trivialen Fixpunkt**[43]. An trivialen Fixpunkten verschwindet im allgemeinen wie oben beschrieben die Längenskala des Systems zwar auch, aber nicht weil  $\xi \rightarrow \infty$ , sondern weil  $\xi = 0$ . Für  $d < 4$  wird der Gaussian *fixed point* instabil (s.u.) bezüglich des **Wilson-Fisher fixed point**, d.h. er erhält eine neue relevante Variable, deren zugehöriger Eigenvektor in den nicht-trivialen Wilson-Fisher *fixed point* zeigt[45]. Dieser Fixpunkt ist der eigentlich interessante, je nach  $n$  heißt er dann *Ising fixed point* oder *Heisenberg fixed point* [43] etc. Bei diesen nichttrivialen oder auch **kritischen Fixpunkten** divergiert die Korrelationslänge  $\xi$ .

Fixpunkte heißen *singly unstable* und gehören dann zu **einfachen kritischen Fixpunkten**, wenn sie bezüglich einer Variable, typischerweise die der Temperatur assoziierten, relevant sind. **Doppelt kritisch** heißen sie, wenn mehr als eine Variable eine Rolle spielt, etwa die Temperatur und das äußere Feld. Sie korrespondieren dann zu **trikritischen** Punkten, wie in der  $\phi^6$ -Landau Theorie, wo neben  $r_0 = 0$  auch  $u_0 = 0$  sein mußte. Auch Phasenübergänge erster Ordnung lassen sich im Flußdiagramm identifizieren. Sie finden statt, wenn der Fluß „divergiert“ also bei endlicher Temperatur über jede Beschränkung führt [13, 56].

### $\phi^4$ -Theorie und $4 - \epsilon$ -Entwicklung

Die oben angestellten Betrachtungen zur Entwicklung der *Landau-Ginzburg*-Zustandssumme (1.76) in Potenzen von  $u_0$  und den  $4 \times n$ -Punkt-Korreationsfunktionen münden in der  $\phi^4$ -Theorie [57], die sich ebenfalls der Methoden der Renormierungsgruppe bedient [58, 59]. Auf diese umfangreiche Theorie soll in dieser Arbeit bis auf folgende Anmerkungen nicht weiter eingegangen werden.

Ein gängiges Verfahren ist die Entwicklung um vier Raumdimensionen, in  $\epsilon = 4 - d$ , wo die Exponenten die MF-Werte annehmen. In seinen ersten Veröffentlichungen zum Thema [49, 50] hat *Wilson* (Nobelpreis 1982), der „Vater der Renormierungsgruppe“ (wenngleich von *Murray Gell-Mann* (Nobelpreis 1969) und *Francis E. Low* motiviert), in seinen zunächst beliebige Raumdimensionen zugelassen. In ihrem gemeinsamen Artikel von 1972 [60] zeigen Wilson und Fisher, daß sich  $\gamma$  in  $\epsilon$  entwickeln läßt. In einem weiteren üblichen Ansatz wird im Inversen der Spin-Dimension, also in  $1/n$  entwickelt, so auch in der weiter unten in dieser Arbeit skizzierten Theorie des chiralen Phasenübergangs [4].

## 1.5 Symmetrien und Universalität

**Universalität** bezeichnet die Tatsache, daß kritisches Verhalten unabhängig von mikroskopischen Eigenschaften des Systems ist. Es wird vielmehr erwartet, daß entscheidend für das jeweilige Verhalten am kritischen Punkt nur die Raumdimension und die verschiedenen Symmetrien in HTP bzw. LTP sind, wobei es wiederum von den oben erwähnten Feldparametern abhängt, ob ein spezieller Fixpunkt überhaupt erreicht wird (catchment area, s.o.). Die Hypothese, daß kritisches Verhalten nur unwesentlich, im Falle kritischer Exponenten sogar überhaupt nicht von mikroskopischen Effekten abhängt, hat Fisher als **Universalitätshypothese** eingeführt. Physikalisch anscheinend völlig verschiedene Systeme fallen in

dieselbe **Universalitätsklasse**, wenn sie die gleichen kritischen Exponenten zeigen, d.h. den gleichen Fixpunkt im Renormierungsfluß erreichen. Motiviert ist diese Einteilung sicherlich auch durch die Theorie der **korrespondierenden Zustände** [61, 10] von Gasen in der gasförmig/flüssig Koexistenz. Prominentes Beispiel für Universalität ist die „Messung“ der kritischen Exponenten (gemessen wurde die spezifische Wärme im Bulk) des dreidimensionalen XY-Modells an flüssigem Helium [62].

Die erwähnten Symmetrien beziehen sich jeweils auf den Hamiltonian: Man sagt von einem Hamiltonian er habe eine bestimmte Symmetrie, wenn er invariant ist gegenüber der Anwendung der Symmetrieeoperation auf seine Konfiguration. Dann nämlich ist in der ungebrochenen Phase die Wahrscheinlichkeit einer Konfiguration die gleiche wie die der Konfiguration  $\Sigma' = \Omega \Sigma$  mit  $\Omega$  einer Operation der betrachteten Symmetriegruppe:

$$W(\Sigma) = W(\Sigma') \quad . \quad (1.107)$$

In LTP ändert sich die Situation jedoch grundlegend. Hier herrscht nicht mehr allein die Symmetrie des Hamiltonian, denn sie ist durch das Auftreten einer spontanen Magnetisierung gebrochen. Der Limes in (1.23) legt deren Richtung eindeutig fest. Daher sind nicht mehr alle Konfigurationen gleicher Energie äquivalent, sondern nur noch solche, denen gegenüber auch der Ordnungsparameter invariant ist, denn die Wahrscheinlichkeit für eine Konfiguration, die für den Ordnungsparameter die „falsche Richtung produziert“, verschwindet. Der Grundzustand, von dem man annimmt, daß seine Wahrscheinlichkeit stetig mit sinkender Temperatur in LTP steigt, dient als charakteristische Konfiguration in LTP und daher ist seine Symmetrie die Symmetrie der Tieftemperaturphase. Diese heuristische Methode des Auffindens der Symmetrie in LTP kann selbstverständlich nicht mehr funktionieren, wenn zwei oder mehr Phasenübergänge bei verschiedenen Temperaturen stattfinden. Dann ist es in der Tat nötig, die Tieftemperaturphase hinsichtlich seiner Symmetrien genauer zu untersuchen.

### 1.5.1 $O(n)/O(n-1)$

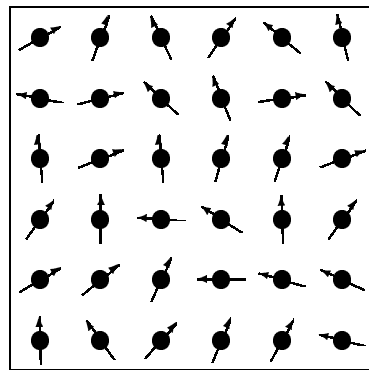
Einen Hamiltonian der Form

$$\mathcal{H} = -J \sum \mathbf{s}_i \mathbf{s}_j - \sum \mathbf{s}_i H \quad (1.108)$$

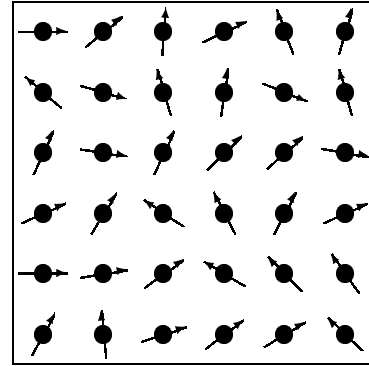
wie in (1.22) läßt eine Drehspiegelung aller Spins, d.h. eine Symmetrieeoperation aus  $O(n)$ , für  $H = 0$  unverändert. Neben den Drehspiegelungen mag es noch weitere Symmetrieeoperationen auf den Konfigurationen geben, die hier jedoch zunächst nicht weiter interessieren. Wenn das System (1.108) nun in LTP parallel ordnet, so sind nur noch Operationen zulässig, die die Spinkomponenten in  $\mathbf{M}_s$ -Richtung unverändert lassen, also  $O(n-1)$ . Alle anderen Symmetrien bleiben unberührt. Man bezeichnet diesen typisch ferromagnetischen Phasenübergang daher auch als  $O(n)/O(n-1)$ . Das *Ising*-Modell wird von dieser Bezeichnung ebenfalls erfaßt. Hier ist  $n = 1$  und man bezeichnet diesen Phasenübergang wegen  $O(1) = Z_2$  und  $O(0) = id.$  auch einfach als  $Z_2$ -Phasenübergang. Der gekürzte Ausdruck  $O(n)/O(n-1)$  ist der **breakdown of symmetry**<sup>3</sup>, er ist für  $n = 1$  daher  $Z_2$ , für  $n = 2$  ist er  $S_1 = SO(2)$  wegen  $O(n) = Z_2 \times SO(n)$ .

In Abb. 1.12 sind die beiden Symmetrieeoperationen Rotation und Spiegelung exemplarisch an einem 2D-XY-Modell dargestellt: Das linke Bild zeigt eine Konfiguration, wie sie sowohl in LTP als auch in HTP vorkommen könnte (jedoch ist sie wegen der hohen

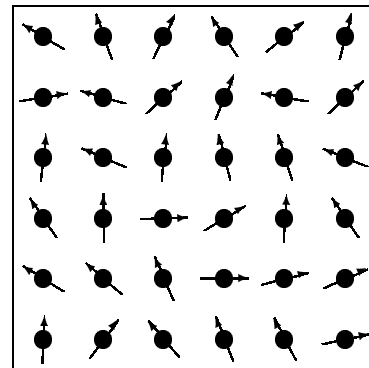
<sup>3</sup>Daneben existiert jedoch auch ein **enhancement of symmetry**, wie es für antiferromagnetische 3-Zustands-Potts-Modell für  $d = 3$  erwartet wird. [63]



Ausgangskonfiguration  
 $M = (24, 0)$  und  $E = -30.7$



Rotation um  $-30^\circ$   
 $M = (20.8, 12)$  und  $E = -30.7$



Spiegelung an der  $M$ -Achse  
 $M = (24, 0)$  und  $E = -30.7$

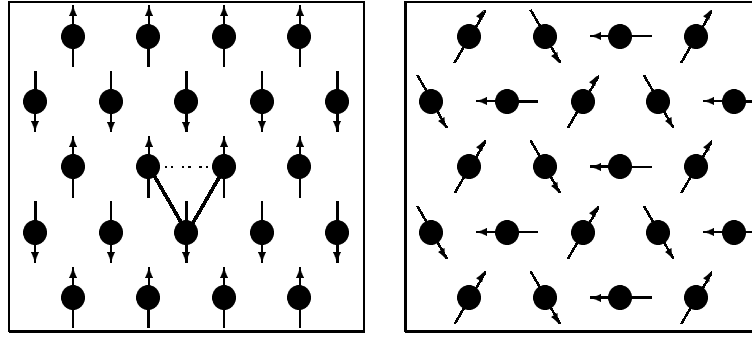
**Abbildung 1.12:** Eine exemplarische Anwendung der Symmetrioperationen aus  $O(2)$  nämlich Rotation ( $SO(2)$ ) und Spiegelung ( $Z_2$ ) auf eine Konfiguration des 2D-XY. Magnetisierung  $M$  und Energie  $E$  sind jeweils angegeben. Nur eine Spiegelung an einer Achse entlang der Magnetisierungsrichtung läßt  $M$  unverändert.

Magnetisierung in HTP sehr unwahrscheinlich). Eine Rotation aller Spins um  $30^\circ$  läßt die Energie unverändert, wie das obere rechte Bild zeigt, ändert jedoch die Magnetisierung. Eine Spiegelung an der Magnetisierungsachse, wie im unteren rechten Bild dargestellt, läßt sowohl Energie als auch Ordnungsparameter unverändert.

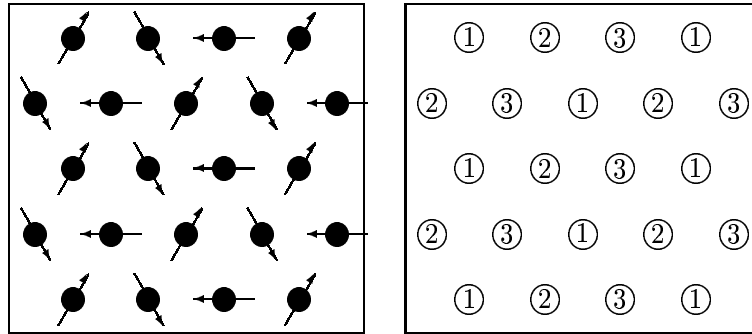
Ist im HTP die Symmetrie  $O(n)$ , so ist der *breakdown of symmetry* im Falle eines kollinearen Grundzustandes grundsätzlich mindestens  $O(n)/O(n-1)$ . Wenn der Hamiltonian so einfach ist wie (1.108), ist das in der Tat für alle einfach hyperkubischen Gitter der Fall, unabhängig von der Tatsache, ob die Wechselwirkung ferromagnetisch oder antiferromagnetisch ist.

### 1.5.2 Kompliziertere Symmetrien

Dem  $O(n)/O(n-1)$ -Übergang stehen kompliziertere Modelle gegenüber. So ordnet das antiferromagnetische *Heisenberg-FCC*-Gitter, also  $d = 3$  und  $n = 3$ , zwar kollinear, enthält jedoch eine zusätzliche Symmetriebrechung  $Z_3$ , die in der komplizierteren Gitterstruktur begründet liegt [64]. Der *Heisenberg-FCC*-Magnet stellt den ersten hier erwähnten Fall von **Frustration** dar. Darunter versteht man die Abwesenheit vollständiger Befriedigung der



**Abbildung 1.13:** In einem antiferromagnetischen Dreiecksgitter mit nächster-Nachbar-Wechselwirkung hat eine kollineare Ordnung eine höhere Energie (linkes Bild, Energie in einem Dreieck  $E = -1$ ) als eine  $120^\circ$ -Struktur (rechtes Bild, Energie in einem Dreieck  $E = -1.5$ ). Während rechts jede Wechselwirkung mit  $-0.5$  beiträgt, sind links je zwei Verbindungslinien voll gesättigt (für ein Dreieck fett eingezeichnet) während je eine vollständig ungesättigt (gestrichelt) ist.



**Abbildung 1.14:** Die drei Untergitter des Grundzustandes des antiferromagnetischen Dreiecksgitters. Links noch einmal die Zeichnung wie in (1.13), rechts die Einteilung der Untergitter mit arabischen Ziffern.

Wechselwirkung im Grundzustand; der Grundzustand besteht also nicht aus vielen lokalen Konfigurationen minimaler Energie, sondern liegt energetisch höher, was darauf zurückzuführen ist, daß verschiedene Wechselwirkungen, die verschiedene lokale Konfigurationen favorisieren, im Wettbewerb stehen.

Man findet Frustration in allen homogenen antiferromagnetischen Systemen, wenn es möglich ist, eine ungerade Zahl von Spins miteinander in einer geschlossenen Schleife über *bonds* zu verbinden. Abb. 1.13 zeigt ein antiferromagnetisches XY-Dreiecksgitter mit einem Hamiltonian der Form (1.108) mit nächster-Nachbar-Wechselwirkung. Eingezeichnet ist darin eine Schleife, die drei Spins miteinander verbindet. Zwei dieser drei Verbindungslinien lassen sich vollständig antiferromagnetisch sättigen (fett), die dritte ist dann zwangsläufig maximal ungesättigt (gepunktet).

Der Grundzustand in solchen Systemen ist daher häufig, aber nicht immer (wie für das *Heisenberg*-FCC-Gitter erwähnt) nicht-kollinear. Die rechte Seite von Abb. 1.13 zeigt eine Konfiguration geringster Energie, eine  $120^\circ$ -Struktur. Im oben erwähnten Fall des FCC-Gitters existiert zwar auch ein nicht-kollinearer Grundzustand, eine Tetragonalstruktur, jedoch läßt sich zeigen, daß Spinwellen bei allen  $T \neq 0$  die nicht-kollineare Struktur immer zugunsten der kollinearen zerstören.

Die Symmetrie des antiferromagnetischen XY-Dreiecksgitters mit Nächster-Nachbar-

Wechselwirkung ist in HTP  $O(n)$ . Die Symmetrie in LTP ist nicht sofort zu erkennen, zumal noch kein Ordnungsparameter definiert ist. Seine Definition lautet

$$\mathbf{M}_s^{triang} = \sum_i^3 \mathcal{R}_{\frac{2}{3}}^i \mathbf{M}_{s_i} \quad , \quad (1.109)$$

wobei  $\mathbf{M}_i$  die spontane Magnetisierung eines jeweils kollinearen Untergitter bezeichnet, wie in Abb. 1.14 dargestellt.  $\mathcal{R}_{\frac{2}{3}}$  bezeichnet die Rotationsmatrix um  $2\pi/3$ , so daß also die Magnetisierung  $\mathbf{M}^{triang}$  maximal wird für eine  $120^\circ$ -Struktur. In diesem Sinne wird nun die spontane Magnetisierung für jedes Untergitter [65]

$$\mathbf{M}_{s_i}^{triang} = \lim_{\mu \rightarrow 0_+} \langle \mathbf{M} \rangle (\mu \mathcal{R}_{\frac{2}{3}}^i \mathbf{H}_0) \quad (1.110)$$

ganz analog zu (1.23) geschrieben. Tatsächlich gibt es keine nichttriviale Symmetrieeoperation mehr, die man in LTP auf den Spinraum anwenden könnte, ohne die eben definierte spontane Magnetisierung zu ändern. Die Symmetrie in LTP ist  $O(0) = id. = 1$  und der *breakdown of symmetry* daher  $O(2)/O(0)$ . Dieses Verhalten des antiferromagnetischen XY-Dreiecksgitter ist prototypisch für frustrierte Systeme. Aufgrund des Mermin-Wagner-Theorems (s.u.) ist für das zweidimensionale Dreiecksgitter kein Phasenübergang zweiter Ordnung zu erwarten<sup>4</sup>, jedoch für das gestapelte antiferromagnetischen XY-Dreiecksgitter, kurz XY-STA. Ein anderes System der Klasse  $O(n)/O(n-2)$  [67] wäre das gestapelte *Heisenberg*-Dreiecksgitter ( $d = 3$  und  $n = 3$ ). Es ordnet koplanar, so daß die Symmetrie in LTP  $O(1)$  ist, der *breakdown of symmetry* also  $O(3)/O(1)$ .

Ein weiteres System der Klasse  $O(n)/O(n-2)$  ist das XY-STAR, wobei das 'R' für **local rigidity** steht [65]. Man entfernt dabei einige Freiheitsgrade des Systems, indem man für jedes Dreieck des Gitters fordert, daß die drei beteiligte Spins sich zu 0 summieren:

$$\mathbf{s}_i^1 + \mathbf{s}_i^2 + \mathbf{s}_i^3 = \mathbf{0} \quad . \quad (1.111)$$

wobei der hochgestellte Index sich auf die Position des Spins im Dreieck mit Index  $i$  bezieht. Da die Länge der Spins festgelegt ist, gibt es nur zwei Möglichkeiten für die Lage beiden anderen Spins, wenn einer gegeben ist. Die beiden Möglichkeiten sind in Abb. 1.15 dargestellt. Das '+' und das '-' Zeichen in Abb. 1.15 beziehen sich auf die Chiralität  $\kappa$  der beiden Konfigurationen:

$$\kappa_i = \frac{2}{3\sqrt{3}} \left[ \mathbf{s}_i^1 \times \mathbf{s}_i^2 + \mathbf{s}_i^2 \times \mathbf{s}_i^3 + \mathbf{s}_i^3 \times \mathbf{s}_i^1 \right] \quad . \quad (1.112)$$

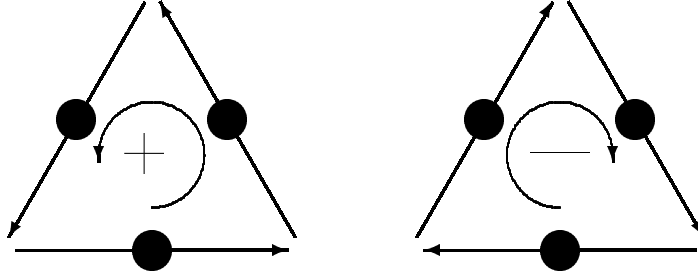
Die Chiralität ist positiv, wenn man das Dreieck in mathematisch positiver Richtung durchlaufen muß, um die Spins mit ansteigendem Orientierungswinkel abzulaufen.

Für die Symmetriebetrachtungen ist nun zu beachten, daß das System auf Grund der Randbedingung (1.111) statt der drei kontinuierlichen Freiheitsgrade pro Dreieck nur noch einen kontinuierlichen und zusätzlich einen *Ising*-artigen besitzt. Um dies auch im Hamiltonian wiederzugeben, läßt sich dieser umschreiben, indem die Konfigurationen aller Spins durch die Konfigurationen aller „Superdreiecke“ ausgetauscht werden, wie in Abb. 1.16 dargestellt.

Mit ein wenig linearer Algebra läßt sich der Hamiltonian (1.108) umschreiben, so daß er neben den Orientierungen der in Abb. 1.16 markierten „anchor-spins“ der Superdreiecke nur noch deren Chiralität enthält. Mit diesen beiden Angaben - alle Chiralitäten

---

<sup>4</sup>Man findet hier zwei aufeinanderfolgende Symmetriebrechungen, zunächst  $O(2) \rightarrow SO(2)$  also einen *Ising*-Übergang und darauffolgend bei etwas tieferer Temperatur einen KT-Übergang [66]



**Abbildung 1.15:** Das STAR-Modell läßt bei einem vorgegebenen Spin nur zwei Möglichkeiten für die beiden anderen. Die beiden Konfigurationen unterscheiden sich durch ihr Chiralität.

und die Orientierung der anchor-spins der Superdreiecke - ist die Konfiguration eindeutig festgelegt. Man findet dann, daß die anchor-spins in HTP nur noch  $SO(2)$ -Symmetrie besitzen. Spiegelungen auf diese Spins allein angewendet lassen die Energie im allgemeinen nicht invariant. Die Situation ändert sich, wenn zusätzlich zu einer beliebigen Spiegelung der anchor-spins die Chiralitäten invertiert werden. Diese zusammengesetzte Operation der gleichzeitigen Spiegelung der anchor-spins und der Invertierung der Chiralitäten ist äquivalent zur gleichzeitigen Spiegelung *aller* Spins, an einer gemeinsamen Spiegelachse. Man erhält damit die verlorengegangene  $Z_2$ -Symmetrie als zusammengesetzte Symmetrie zurück. Da in LTP wiederum alles „eingefroren“ ist, also sowohl die  $SO(2)$  als auch die  $Z_2$ -Symmetrie, ist der *breakdown* auch dieses Systems  $SO(2) \times Z_2/O(0)$  also  $O(2)/O(0)$ .

### 1.5.3 Das Stiefel-Modell

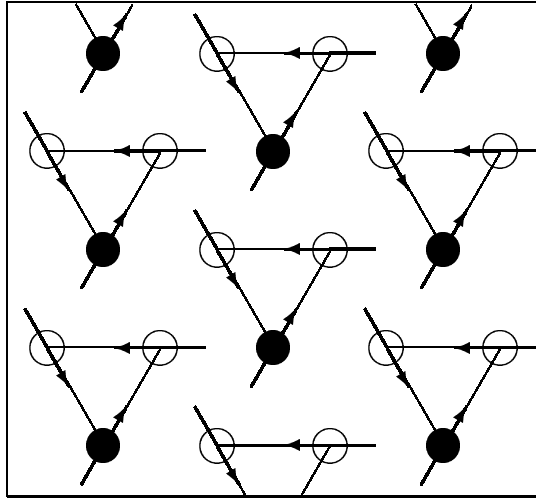
Das Stiefel-Modell [68] besitzt den gleichen *breakdown of symmetry* wie die oben genannten frustrierten Systeme, also  $O(n)/O(n-2)$  ist jedoch selbst nicht frustriert. Das hat den Vorteil, daß es sich wesentlich besser simulieren läßt.<sup>5</sup>

Das Original-Modell von *Kunz* und *Zumbach* [68],  $V_{n,p}$ , ist sehr viel allgemeiner, nämlich  $p$ -beinige Spins in  $n$  Spindimensionen. Bei dem in dieser Arbeit verwendeten Stiefel-Modell handelt es sich um die einfachste Variante, bei dem die lokalen, zweidimensionalen Spins durch Zweibeine ersetzt werden, also in der Original-Notation  $V_{2,2}$ . Der allgemeine Hamiltonian dieses Modells lautet ohne äußeres Feld:

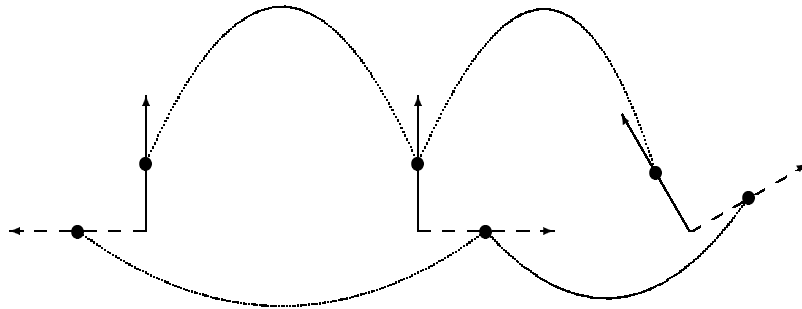
$$\mathcal{H} = -J \sum_{i,nn,j} \sum_{\alpha=1}^p \sigma_{\alpha i} \sigma_{\alpha j} \quad , \quad (1.113)$$

wobei  $\sigma_{\alpha i}$  das  $\alpha$ te Bein am Ort  $i$  bezeichnet. Etwas anschaulicher ist folgendes Bild für das Zweibein: Angenommen der eine Schenkel eines solchen Zweibeins sei durchgezogen, der andere gestrichelt, so würden ausschließlich die Schenkel gleichen Linientyps miteinander wechselwirken. In Abb. 1.17 ist diese Wechselwirkung angedeutet, indem jeweils nur die gestrichelten bzw. durchgezogenen Beine miteinander verbunden sind. Die Zweibeine

<sup>5</sup>Da in frustrierten Systemen die globalen Energie-Minima weniger tief ausfallen, sind breitere Verteilungen der Konfigurationen plausibel.



**Abbildung 1.16:** Ein Grundzustand des STAR. Die ausgefüllten Kreise bezeichnen die „anchor-spins“ der Superdreiecke. Zur Angabe der gesamten Konfiguration reicht die Angabe der Orientierung der anchor-spins und der Chiralitäten aller Superdreiecke (hier alle +).



**Abbildung 1.17:** Im Stiefel-Modell wechselwirken nur Beine „gleicher Sorte“ miteinander (hier: durchgezogen bzw. gestrichelt). Die Wechselwirkung ist durch den gepunkteten Bogen angedeutet. Die Konfigurationen  $\{\theta_i, \sigma_i\}$  der drei dargestellten Zweibeine sind von links nach rechts:  $\{\pi/2, -1\}$ ,  $\{\pi/2, +1\}$ ,  $\{2\pi/3, +1\}$ , wobei jeweils die Orientierung des durchgezogenen Beins angegeben ist,  $\mathbf{s}_i = (\cos(\theta_i), \sin(\theta_i))$ , und die mittlere Abbildung als diejenige positiver Chiralität definiert wurde.

haben einen festen relativen Winkel von  $90^\circ$  und lassen sich frei rotieren und spiegeln. Für  $n = 2$  besteht daher eine lokale Konfiguration aus der Angabe eines Winkels eines Schenkels, etwa des gestrichelten, und einer zusätzlichen *Ising*-Variablen, die die „Händigkeit“, also die Chiralität des Zweibeins beschreibt. Der Hamiltonian schreibt sich dann

$$\mathcal{H}_{\text{Stiefel}} = -J \sum_{i.nn.j} (1 + \sigma_i \sigma_j) \mathbf{s}_i \mathbf{s}_j \quad , \quad (1.114)$$

wobei die  $\sigma_i \in \{-1, 1\}$  die Chiralität des  $i$ ten Stiefels angibt und  $\mathbf{s}_i$  dessen Orientierung.

Um den oben genannten *breakdown of symmetry*  $O(2)/O(0)$  zu beobachten, ist es nun nicht mehr nötig, ein Dreiecksgitter zu konstruieren; die Zweibeine leben in zwei Dimensionen auf einem einfachen Quadratgitter. Daher ist auch die Wahl von  $J$ , also die Wahl ob die Wechselwirkung ferro- oder antiferromagnetisch sein soll, zweitrangig; der *breakdown of symmetry* ist davon unberührt und frustriert ist das System auch im Falle antiferromagnetischer Wechselwirkung nicht.

Es lassen sich hier zwei Ordnungsparameter untersuchen. Der eine, die Chiralität  $M_\kappa$ ,

ist die Summe aller  $\sigma_i$ , also  $M_\kappa = \sum_i \sigma_i$ , der andere

$$\mathbf{M}_{XY} = (\sum_i \mathbf{s}_i + \sum_i \sigma_i \mathbf{s}_i)/2 \quad (1.115)$$

also die Summe der Magnetisierung der gestrichelten und der durchgezogenen Beine (ohne Berücksichtigung der Tatsache, daß die Beine eigentlich senkrecht aufeinander stehen).

Da die beiden Beine des Stiefels völlig gleichberechtigt sind, ist der Erwartungswert der Magnetisierung des einen Beins  $\sum_i \mathbf{s}_i$  gleich der der Magnetisierung des anderen Beins  $\sum_i \sigma_i \mathbf{s}_i$  und daher  $\mathbf{M}_{XY} = \sum_i \mathbf{s}_i = \sum_i \sigma_i \mathbf{s}_i$ .

Um die spontane Magnetisierung auch formell zu rechtfertigen, muß der Hamiltonian (1.114) um äußere Felder erweitert werden:

$$\mathcal{H}_{\text{Stiefel}} = -J \sum_{i,nn,j} (1 + \sigma_i \sigma_j) \mathbf{s}_i \mathbf{s}_j + \mathbf{H}_s \sum_i \mathbf{s}_i + H_\sigma \sum_i \sigma_i \quad . \quad (1.116)$$

Dann ergibt sich als Ordnungsparameter sofort als Tupel

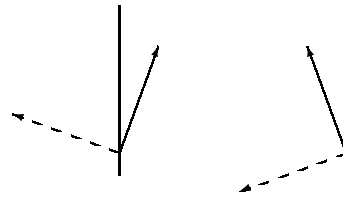
$$\mathbf{M} = (\sum_i \mathbf{s}_i, \sum_i \sigma_i) \quad (1.117)$$

bzw. in den Komponenten dieses Tupels als

$$\mathbf{M}_{XY} = \sum_i \mathbf{s}_i \quad (1.118)$$

$$M_\kappa = \sum_i \sigma_i \quad . \quad (1.119)$$

Vom Hamiltonian (1.114) läßt sich sofort  $O(2)$  als Symmetrie der  $s_i$  in HTP ablesen. Daneben lassen sich auch alle Chiralitäten invertieren, ohne die Energie zu verändern, daher ist die Symmetrie dieses Modells  $O(2) \times Z_2$  in HTP. In LTP sind die Chiralitäten hingegen fixiert, jedoch besitzt ein Typ von Beinen, nämlich der, der von den  $\mathbf{s}_i$  repräsentiert wird, noch eine  $Z_2$ -Symmetrie, da die Beine kollinear ordnen; läßt man eine Spiegelung nur auf eine Sorte von Beinen wirken, wie in Abb. 1.18 dargestellt, so bleibt die Konfiguration im



**Abbildung 1.18:** Wenn die Spiegelungsoperation nur auf ein Bein des Stiefels wirkt, bleibt die Chiralität unverändert.

Falle eines kollinearen Ausgangszustandes bei Spiegelung an eben dieser Achse unverändert. Von der  $O(2)$ -Symmetrie bleibt in LTP also  $Z_2$  übrig, genauso wie es im Falle eines 2D-XY-Modells sein würde, wenn es ordnete. Der *breakdown of symmetry* ist daher  $O(2) \times Z_2/Z_2$ , wenn man kürzt also  $O(2)/1 = O(2)$  oder  $O(2)/O(0)$ . Jedoch ist zu betonen, daß es sich bei der gekürzten  $Z_2$ -Symmetrie in HTP um die Symmetrie in der Chiralität handelt, in LTP um eine Reminiszenz der  $O(2)$  in HTP.

Den Schlußpunkt dieser Arbeit wird eine Untersuchung des Phasenübergang  $O(2)/O(0)$  am Stiefel-Modell auf fraktalen Gittern bilden.

## 1.5.4 Symmetrien – Übersicht

| Modell                               | $d$ | $n$ | HTP               | LTP          | HTP/LTP gekürzt                                                  |
|--------------------------------------|-----|-----|-------------------|--------------|------------------------------------------------------------------|
| 2D- <i>Ising</i>                     | 2   | 1   | $O(1) = Z_2$      | 1            | $Z_2$                                                            |
| 2D-XY                                | 2   | 2   | $O(2)$            | $O(1) = Z_2$ | $SO(2) = S_1$ (KT)                                               |
| XY-triangular                        | 2   | 2   | $O(2)$            | $O(0) = 1$   | $O(2) = SO(2) \times Z_2$<br>(KT und Ising<br>nacheinander) [66] |
| 3D- <i>Ising</i>                     | 3   | 1   | $O(1) = Z_2$      | 1            | $Z_2$                                                            |
| 3D-XY (ferro)                        | 3   | 2   | $O(2)$            | $O(1)$       | $SO(2) = S_1$                                                    |
| XY-STA                               | 3   | 2   | $O(2)$            | $O(0) = 1$   | $O(2)$ (frustriert)                                              |
| XY-STAR                              | 3   | 2   | $O(2)$            | $O(0) = 1$   | $O(2)$ (frustriert)                                              |
| XY-Stiefel                           | 3   | 2   | $O(2) \times Z_2$ | $O(1) = Z_2$ | $O(2)$ (nicht frustriert)                                        |
| 3D- <i>Heisenberg</i> (ferro)        | 3   | 3   | $O(3)$            | $O(2)$       | $SO(3)/SO(2) = S_2$                                              |
| 3D- <i>Heisenberg</i> (antiferro sc) | 3   | 3   | $O(3)$            | $O(2)$       | $SO(3)/SO(2) = S_2$                                              |
| 3D- <i>Heisenberg</i> (STA)          | 3   | 3   | $O(3)$            | $O(1)$       | $SO(3)$                                                          |

1.6 Lösung des 2D-*Ising*

Das 2D-*Ising* Modell ist auf die vielfältigsten Weisen gelöst worden. Nachdem 1941 *Kramers* und *Wannier* [51, 52] die kritische Temperatur des zweidimensionalen *Ising*-Modells mit Hilfe der Methode des dualen Gitters [69] angeben konnten, fand *Onsager* [2] (Nobelpreis für Chemie 1968) mit Hilfe der bereits erwähnten Transfermatrixmethode eine Lösung für die Zustandssumme ohne äußeres Feld. Im Laufe der Jahre kamen exakte Lösungen anderer Größen hinzu [3] und man kann sagen, daß die meisten neue Methoden, exakt oder approximativ, analytisch oder numerisch, am 2D-*Ising* getestet wurden.<sup>6</sup>

Die Herleitung der Lösung des 2D-*Ising* ist in vielen Textbüchern angegeben und daher soll hier auf eine detaillierte Darstellung verzichtet und nur aufzählend die wichtigsten Ergebnisse genannt werden. Wenn nicht anders angegeben, stammen die Gleichungen aus [3]. Ergebnisse zu anderen exakt lösbaaren Spin-Systemen finden sich in [71]

## 1.6.1 Exakte Lösungen

## Magnetisierung

$$M = (1 - \sinh^2(2\beta J))^{1/8} \quad (1.120)$$

womit mit  $\sinh^2(2\beta_c J) = 1$  auch gleich die kritische Temperatur gegeben ist

$$\beta_c = \ln(\sqrt{2} + 1)/2 \quad . \quad (1.121)$$

## spezifische Wärme

$$c = \frac{J^2}{k_B T^2} \quad ( \quad -2 \sinh^{-2}(2\beta J) - 4\pi^{-1} \coth^2(2\beta J) \mathbf{E}(k) \quad (1.122)$$

$$-4\pi^{-1} \coth^2(2\beta J) [\cosh^{-2}(2\beta J) (2 \tanh^2(2\beta J) - 1) \quad (1.123)$$

$$-4 \tanh^2(2\beta J) \cosh^{-2}(2\beta J) - (2 \tanh^2(2\beta J) - 1)^2] \mathbf{K}(k) )$$

<sup>6</sup>Es spricht nach *Binder* jedoch einiges dagegen, das 2D-*Ising* zu Testzwecken zu verwenden [70], weil es breitere Fluktuationen zeigt, als etwa das dreidimensionale *Ising*-Modell.

wobei  $\mathbf{K}(k)$  das vollständige elliptische Integral erster Gattung

$$\mathbf{K}(k) = \int_0^{\pi/2} d\phi (1 - k^2 \sinh^2(\phi))^{-1/2} \quad (1.124)$$

und  $\mathbf{E}(k)$  das vollständige elliptische Integral zweiter Gattung

$$\mathbf{E}(k) = \int_0^{\pi/2} d\phi (1 - k^2 \sinh^2(\phi))^{1/2} \quad (1.125)$$

sowie

$$k = 2 \frac{\sinh(2\beta J)}{\cosh^2(2\beta J)} \quad (1.126)$$

Nahe  $T_c$  vereinfacht sich  $c$  zu

$$c \propto (\ln(|1 - T/T_c|) + \ln(J\beta_c \sqrt{2})) \quad . \quad (1.127)$$

### Korrelationslänge

Aus dem Verhalten von  $\langle \sigma_{(0,0)} \sigma_{(N,N)} \rangle$  findet man für große  $N$  in HTP

$$\xi_{HTP} = -\sqrt{2} \ln(\sinh(2J\beta)) \quad (1.128)$$

und in LTP

$$\xi_{LTP} = 2\sqrt{2} \ln(\sinh(2J\beta)) \quad . \quad (1.129)$$

## 1.6.2 Approximative Lösung

### Suszeptibilität

Zunächst sei das Ergebnis aus einem Artikel von Wu et.al genannt [72]

$$\chi T = C_{0\pm} |1 - T_c/T|^{-7/4} + C_{1\pm} |1 - T_c/T|^{-3/4} + \mathcal{O}(1) \quad , \quad (1.130)$$

wobei

$$\begin{aligned} C_{0+} &= 0.962\,581\,732\,2 \dots \\ C_{0-} &= 0.025\,536\,971\,9 \dots \\ C_{1+} &= 0.074\,988\,153\,8 \dots \\ C_{1-} &= -0.001\,989\,410\,7 \dots \end{aligned} \quad (1.131)$$

Man beachte  $|C_{0+}/C_{0-}| = |C_{1+}/C_{1-}| = 37.69365\dots$ . Die Indizes  $+$  und  $-$  beziehen sich jeweils auf *HTP* ( $+$ ) bzw. *LTP* ( $-$ ). Die *correction to scaling* ist offenbar  $\omega_1 = 1$ .

Die folgende Padé-Approximation hat sich in HTP als sehr brauchbar erwiesen [73], ebenso die darauffolgende Approximation von *Essam* und *Fisher* in LTP [74]:

$$\begin{aligned} \chi^{\text{HTP}} T \approx & [(1.0 + 4.4331741w + 6.6323991w^2 + 4.7961072w^3 + 1.7261877w^4 \\ & - 0.33157888w^5 - 0.57263274w^6 - 4.3028266w^7) \\ & (1.0 + 2.1474598w - 3.1740397w^2 - 11.015221w^3 - 13.264413w^4 \\ & - 9.5895365w^5 - 6.7966830w^6 - 9.7192691w^7)^{7/4}] \quad , \end{aligned}$$

wobei  $w = \tanh(\beta J)$ .

In LTP ist

$$\chi^{\text{LTP}} T \approx 4u^2 \left( 1 + \sum_{n=1} h_n u^n \right) \quad (1.132)$$

mit  $u = e^{-4\beta J}$  und  $h_n$  wie folgt:

| $n$ | $h_n$    | $h'_n$    |
|-----|----------|-----------|
| 1   | 8        | 8         |
| 2   | 60       | 60        |
| 3   | 416      | 416       |
| 4   | 2791     | 2791      |
| 5   | 18296    | 18296     |
| 6   | 118016   | 118012    |
| 7   | 752008   | 751944    |
| 8   | 4746341  | 4745661   |
| 9   | 29727472 | 29721472  |
| 10  |          | 184968932 |

wobei die letzten beiden Zeilen von  $h_n$ , 8 und 9, sowie die Spalte  $h'_n$  wiederum aus [72] stammen.

Der Vollständigkeit halber sei der Artikel von *Sykes* et. al. für  $\chi_{HTP}$  erwähnt [75]. Die darin enthaltene Approximation stammt aus einer Hochtemperatur-Entwicklung.

## 1.7 Kritische Exponenten – Übersicht

| Modell                 | $\alpha$        | $\beta$        | $\gamma$      | $\delta$ | $\eta$                                 | $\nu$                                                                                          | $\beta_c$             | Quelle |
|------------------------|-----------------|----------------|---------------|----------|----------------------------------------|------------------------------------------------------------------------------------------------|-----------------------|--------|
| MF                     | 0 (d)           | 1/2            | 1             | 3        | 0                                      | 1/2                                                                                            |                       | [8]    |
| <i>Landau</i>          | 0 (d)           | 1/2            | 1             | 3        |                                        |                                                                                                | [8]                   |        |
| Trikritisch            | 1/2             | 1/4            | 1             | 5        |                                        |                                                                                                |                       | [13]   |
| <i>Gauß</i>            |                 |                |               |          | 0                                      | 1/2                                                                                            | [13]                  |        |
| $4 - \epsilon, 1/n$    |                 |                |               |          | $\frac{\epsilon^2}{2} \frac{n+2}{n+8}$ | $\frac{1}{2} + \frac{n+2}{4(n+8)}\epsilon$<br>$+ \frac{(n+2)(n^2+23n+60)}{8(n+8)^3}\epsilon^2$ |                       | [58]   |
| 2D- <i>Ising</i>       | 0 (1)           | 1/8            | 7/4           | 15       | 1/4                                    | 1                                                                                              | $\ln(\sqrt{2} + 1)/2$ | [8]    |
| 2D- <i>Potts</i> (q=3) | 1/3             | 1/9            | 13/9          | 14       | 4/15                                   | 5/6                                                                                            |                       | [9]    |
| 2D- <i>Potts</i> (q=4) | 2/3             | 1/12           | 7/6           | 15       | 1/4                                    | 2/3                                                                                            |                       | [9]    |
| 3D- <i>Ising</i> (sc)  | 0.1115(37) [76] | 0.3269(6) [77] |               |          |                                        | 0.6308(10) [76]                                                                                | 0.2216544(3) [77]     |        |
| 3D- <i>Ising</i> (bcc) |                 |                | 1.322(3) [78] |          |                                        | 0.674(2) [78]                                                                                  | 0.320427(3) [78]      |        |
| 3D- <i>Ising</i> (RG)  | 0.1080(35)      | 0.3260(8)      | 1.2406(12)    |          | 0.0334(19)                             | 0.6307(12)                                                                                     |                       | [79]   |
| 3D-XY                  | -0.0120(35)     | 0.3470(8)      | 1.3177(15)    | 4.8 [9]  | 0.0351(18)                             | 0.6706(12)                                                                                     |                       | [79]   |
| Helium am Lambda Punkt | -0.01285(38)    |                |               |          |                                        |                                                                                                |                       | [62]   |
| 3D- <i>Heisenberg</i>  | -0.122(5)       | 0.3663(13)     | 1.3893(29)    |          | 0.0358(16)                             | 0.7073(16)                                                                                     |                       | [79]   |

**Tabelle 1.1:** Diese Tabelle ist sicherlich unvollständig und nicht ganz aktuell, die Exponenten sind daher nur als mehr oder weniger gute Richtwerte zu verstehen. Negative Exponenten für  $\alpha$  führen zu einem **cusp**, einer endlichen Spitze mit  $c_H = c_{H0} - |T - T_c|^{-\alpha}$ .

### 1.7.1 Kritische Exponenten in KT-Phasenübergänge

Die kritischen Exponenten des XY-Modells sind temperaturabhängig [31]. Sie lassen sich jedoch umdefinieren, um sie mit den anderen vergleichbar zu machen. Die Definitionen sind wie folgt [30]:

$$\begin{array}{rclcl}
 \xi & \propto & \exp(bt^{-\nu}) & t = (T - T_c)/T_c > 0 \\
 & = & \infty & t < 0 \\
 \chi & \propto & \xi^{2-\eta} & t > 0 \\
 & = & \infty & t < 0 \\
 M & \propto & h^{1/\delta} & t = 0
 \end{array}$$

wobei sich  $\nu = 1/2$ ,  $\eta = 1/4$  und  $\delta = 15$  ergibt und damit in dieser neuen Definition die Exponenten des 2D-*Ising*. Die oben erwähnten Skalengesetze werden umgeschrieben zu [30]:

$$\begin{array}{rclcl}
 \tilde{\gamma} & = & 2 - \eta & = & \frac{\gamma}{\nu} \\
 \tilde{\alpha} & = & -d & = & \frac{\alpha}{\nu} \\
 \delta & = & \frac{d+2-\eta}{d-2+\eta}
 \end{array}$$

womit sich  $\tilde{\gamma} = 7/4$  jedoch  $\tilde{\alpha} = -2$  ergibt.



## Kapitel 2

# Numerische Methoden

Um für ein gegebenes System mit gegebenem Hamiltonian die Zustandssumme zu berechnen, läßt sich in der Regel nicht der gesamte Phasenraum integrieren, einfach weil er viel zu groß ist. Eine Zustandssumme hat die Form

$$\mathcal{Z} = \sum_{q \in \Phi} e^{-\beta \mathcal{H}(q)} \quad , \quad (2.1)$$

wobei die Summe über alle Konfigurationen  $q$  des Phasenraums  $\Phi$  läuft. Der Erwartungswert einer Observablen  $A$  läßt sich dann schreiben als

$$\langle A \rangle = \frac{1}{\mathcal{Z}} \sum_{q \in \Phi} A(q) e^{-\beta \mathcal{H}(q)} \quad . \quad (2.2)$$

Wenn die Summe nun zwar nicht über den gesamten Phasenraum ausgedehnt werden kann, legt Gleichung 2.2 nahe, nur diejenigen Konfigurationen zu betrachten, bei denen das (*Boltzmann*-)Gewicht  $e^{-\mathcal{H}(q)}$  groß ist. Das ist das Konzept des ***importance sampling***. Es muß jedoch vermieden werden, alle Konfigurationen auf ihr Gewicht hin zu durchsuchen. Diese Arbeit wird am bequemsten von einer Wahrscheinlichkeitsverteilung übernommen: Wenn die Konfigurationen mit einer (*Gibbs*-)Wahrscheinlichkeitsverteilung  $e^{-\mathcal{H}(q)}/\mathcal{Z}$  erzeugt werden, ist das Ziel erreicht. **Monte-Carlo** ist der Überbegriff einer ganzen Reihe von Algorithmen, um diese (üblicherweise *Gibbs*-) Verteilung approximativ zu erzeugen.

### 2.1 Markov-Ketten

Den passenden Formalismus zum Verständnis der hier dargestellten numerischen Methoden bieten die sog. **Markov-Ketten**. Ein Prozeß heißt Markov-Kette, wenn er die **Markov-Bedingung** erfüllt [80]:

$$\mathbf{P}(\mathbf{X}_n = \mathbf{s} \mid \mathbf{X}_0 = \mathbf{x}_0, \mathbf{X}_1 = \mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{X}_{n-1} = \mathbf{x}_{n-1}) = \mathbf{P}(\mathbf{X}_n = \mathbf{s} \mid \mathbf{X}_{n-1} = \mathbf{x}_{n-1}) \quad , \quad (2.3)$$

d.h. daß die Wahrscheinlichkeit für eine Zufallsvariable  $X_n$  den Wert  $s$  anzunehmen nur vom Wert der Zufallsvariable  $X_{n-1}$  abhängig ist. Die Intention ist, eine Zufallsvariable zu betrachten, die sich in der Zeit entwickelt, deren augenblicklicher Wert aber nur von ihrem vorherigen Wert abhängt.

Ist darüberhinaus die Wahrscheinlichkeit in (2.3) unabhängig von  $n$ , also  $\mathbf{P}(\mathbf{X}_n = \mathbf{s} \mid \mathbf{X}_{n-1} = \mathbf{x}_{n-1}) = \mathbf{P}(\mathbf{X}_{n-1} = \mathbf{s} \mid \mathbf{X}_{n-2} = \mathbf{x}_{n-2})$  nennt man die Markov-Kette **homogen** und es läßt sich eine Übergangs- oder Wahrscheinlichkeitsmatrix  $W$  formulieren:

$$W_{(ij)} = \mathbf{P}(\mathbf{X}_{n+1} = \mathbf{i} \mid \mathbf{X}_n = \mathbf{j}) \quad , \quad (2.4)$$

also die (bedingte) Wahrscheinlichkeit vom Zustand  $j$  in den Zustand  $i$  überzugehen.<sup>1</sup> Ein solcher Zustand wäre eine Konfiguration  $q$  im oben erwähnten System (2.1), ein *Ising*-Modell mit  $N$  Plätzen und daher  $2^N$  Zuständen benötigte für die Darstellung in einer solchen Matrix  $2^{2N}$  Einträge. Interessant ist diese Betrachtungsweise daher ausschließlich für verallgemeinerte Untersuchungen, die nun an endlichen Markov-Matrizen vorgenommen werden sollen.

Die soeben definierte Matrix  $W$  hat die Eigenschaft

$$\sum_i W_{(ij)} = 1 \quad . \quad (2.5)$$

Daher auch

$$\sum_k (Wq)_k = \sum_k \sum_i W_{(ki)} q_i = \sum_i q_i \sum_k W_{(ki)} = \sum_i q_i \quad . \quad (2.6)$$

Die Eigenschaft (2.5) überträgt sich auf jede Potenz von  $W$ . Mit der Potenz der Matrix erhält man einen Ausdruck für die Zeitreihe oder zeitliche Entwicklung einer Wahrscheinlichkeitsverteilung  $\mathbf{q}_t = \mathbf{W}^t \mathbf{q}_0$ .

Die folgenden Untersuchungen der Markov-Matrix sind nicht streng mathematisch, bieten jedoch eine gute Grundlage, das Monte-Carlo-Verfahren zu verstehen.

### 2.1.1 Voraussetzungen für die Konvergenz

Wenn es möglich ist, eine sehr einfache Markov-Matrix zu realisieren, ohne sie explizit darstellen zu müssen, wäre es von wesentlicher Bedeutung zu wissen, ob und unter welchen Bedingungen die Folge der Potenzen der Matrix  $W^t$  gegen eine Übergangsmatrix  $W^\infty$  konvergiert. Man könnte dann eine Übergangsmatrix  $W^\infty$  durch ausreichend hohe Potenzen der einfachen Matrix  $W$  realisieren.

#### *accessibility* – Ergodizität

Die Annahme, daß es zu jedem Zustand einen Zugang geben muß, nennt man ***accessibility assumption*** [8]. Hier wird diese Annahme benötigt, um zu zeigen, daß nach  $\kappa$  Zeitschritten die Matrix nur noch aus nicht verschwindenden, positiven Elementen besteht. Dazu wird angenommen:

$$\bigwedge_{W_{(ij)}} \bigvee_{\kappa_{(ij)}} (W^{\kappa_{(ij)}})_{(ij)} > 0 \quad . \quad (2.7)$$

Man benötigt also maximal  $\kappa_{ij}$  Zeitschritte, um mit nicht verschwindender Wahrscheinlichkeit vom Zustand  $j$  in den Zustand  $i$  zu gelangen. Da die  $W_{(ij)}$  nicht negativ sind, bleibt diese Eigenschaft für alle höheren Potenzen erhalten. Da die Matrix endlich ist, existiert damit ein  $\kappa$ , so daß für alle  $W_{(ij)}$  gilt  $(W^\kappa)_{(ij)} > 0$ .

<sup>1</sup>In der Literatur wird gelegentlich auch  $W_{(ji)}$ , also die Transponierte, notiert.

Accessibility und **Ergodizität** fallen auf den ersten Blick zusammen. Jedoch bedeutet strenge Ergodizität noch wesentlich mehr: Bei konstanter Energie werden alle Zustände gleicher Energie mit der gleichen Wahrscheinlichkeit erreicht [8]. Dies ist nur für die allerwenigsten Algorithmen überhaupt nachweisbar, denn möglicherweise hängen die Gebiete gleicher Energie nicht zusammen<sup>2</sup>, sondern sind durch Energiebarrieren voneinander getrennt. Ergodizität und die **Ergodentheorie** ist ein Gebiet für sich und soll hier nicht weiter interessieren [81, 82].

### *detailed balance*

Für die zweite Bedingung ist der Titel Abschnitts „Voraussetzungen für die Konvergenz“ irreführend, denn es handelt sich bei der **detailed balance** oder der **Mikroreversibilität** nicht um eine Bedingung, die sicherstellt, daß die Matrix konvergiert, sondern - wie gezeigt werden wird - um eine die den „Grenzwert“ der Matrix festlegt:

$$\hat{p}_j W_{(ij)} = \hat{p}_i W_{(ji)}, \quad (2.8)$$

wobei die  $\hat{\mathbf{p}}$  die Wahrscheinlichkeitsverteilung repräsentieren, gegen die eine initiale Wahrscheinlichkeitsverteilung unter der Evolution durch  $W$  konvergieren soll. Es ist daher konsequenterweise zu erwarten, daß  $W^\infty$  so aussehen wird:

$$\begin{pmatrix} \hat{p}_1 & \hat{p}_1 & \cdots & \hat{p}_1 \\ \hat{p}_2 & \hat{p}_2 & \cdots & \hat{p}_2 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ \hat{p}_N & \hat{p}_N & \cdots & \hat{p}_N \end{pmatrix} \quad (2.9)$$

Dann wäre mit  $W_{(ij)} = \hat{p}_i$  die Bedingung (2.8) tatsächlich erfüllt.

### 2.1.2 Konvergenz

Nun soll das Konvergenzverhalten von  $W^t$  untersucht werden. Die hier dargestellte Form stammt in wichtigen Teilen aus [83].<sup>3</sup> Kurz die Umrisse des folgenden Konvergenzbeweises: Zunächst wird gezeigt, daß das minimale Matrixelemente in einer Zeile wächst und das maximale Matrixelement schrumpft. Die eigentliche Mühe besteht dann darin, zu zeigen, daß beide gegen einen gemeinsamen Grenzwert laufen, indem eine Nullfolge als Majorante ihrer Differenz konstruiert wird.

Sei nun also  $m_k(n) = \min_i W_{(ki)}^n$  und  $M_k(n) = \max_i W_{(ki)}^n$ . Dann gilt

$$\left. \begin{array}{l} W_{(kl)}^{(n+1)} = \sum_i W_{(ki)} W_{(il)}^n \\ \sum_i W_{(ij)}^n = 1 \end{array} \right\} \begin{array}{l} m_k(n+1) \geq m_k(n) \quad \text{und} \quad M_k(n+1) \leq M_k(n) \end{array} \quad (2.10)$$

Das ist sofort einzusehen, wenn man sich vorstellt, daß bei jeder Anwendung der Matrix  $W$  auf  $W^n$  deren einzelnen Elemente nur neu gewichtet werden. Wegen  $m_k(n) \leq M_k(n)$  müssen beide einen endlichen Grenzwert erreichen, der jetzt gesucht werden soll.

<sup>2</sup>Ein lokaler Algorithmus auf dem *Ising*-Modell in LTP wird immer erst eine gewisse Wandenergie aufbringen müssen, um die Magnetisierungsrichtung zu wechseln. Es kann daher gar nicht ergodisch sein.

<sup>3</sup>Es handelt sich im folgenden dabei letztlich um den Beweis des Satzes von *Perron-Frobenius* [80].

Zunächst wird definiert

$$\mathcal{T}(W) \equiv \frac{1}{2} \max_{i,j} \sum_k |W_{(ik)} - W_{(jk)}| \quad . \quad (2.11)$$

Wegen  $2 \min\{x, y\} = x + y - |x - y|$  ist dann

$$\mathcal{T}(W) = 1 - \min_{i,j} \sum_k \min\{W_{(ik)}, W_{(jk)}\} \quad . \quad (2.12)$$

Aus  $W_{(kl)} \geq 0$  folgt damit  $0 \geq \mathcal{T}(W) \geq 1$ . Später soll genau dieses  $\mathcal{T}$  Majorante der Differenz  $M_k(n) - m_k(n)$  werden.

Sei nun  $\mathbf{z} = \mathbf{W}^\dagger \mathbf{w}$  mit einem beliebigen Vektor  $\mathbf{w}$ . Dann ist für je zwei Elemente  $h$  und  $h'$  dieses Vektors

$$z_h - z_{h'} = \sum_j u_j w_j \quad \text{mit} \quad u_j = W_{(jh)} - W_{(jh')} \quad . \quad (2.13)$$

Mit (2.5) ist  $\sum_j u_j = 0$ , und es lassen sich sinnvoll zwei Mengen von Indizes definieren:

$$\mathbb{J}_> \equiv \{j | u_j \geq 0\} \quad (2.14)$$

$$\mathbb{J}_< \equiv \{j | u_j < 0\} \quad . \quad (2.15)$$

Nun wird  $\theta$  definiert, die Summe der positiven Differenzen  $u_j$ :

$$\theta \equiv \sum_{j \in \mathbb{J}_>} u_j = \sum_{j \in \mathbb{J}_>} |u_j| \quad (2.16)$$

$$= - \sum_{j \in \mathbb{J}_<} u_j = \sum_{j \in \mathbb{J}_<} |u_j| \quad (2.17)$$

$$= \frac{1}{2} \sum_j |u_j| = \frac{1}{2} \sum_j |W_{(jh)} - W_{(jh')}| \quad . \quad (2.18)$$

Mit diesem  $\theta$  läßt sich jetzt die Differenz  $z_h - z_{h'}$  abschätzen:

$$z_h - z_{h'} = \theta \left( \frac{\sum_{j \in \mathbb{J}_>} |u_j| w_j}{\sum_{j \in \mathbb{J}_>} |u_j|} - \frac{\sum_{j \in \mathbb{J}_<} |u_j| w_j}{\sum_{j \in \mathbb{J}_<} |u_j|} \right) \quad (2.19)$$

$$\leq \theta (\max_i w_i - \min_i w_i) \quad (2.20)$$

$$\leq \mathcal{T}(W) (\max_i w_i - \min_i w_i) \quad . \quad (2.21)$$

Da dieser Ausdruck für beliebige aber feste  $h, h'$  wahr ist, gilt er insbesondere für die spezielle Wahl  $z_h = \max_i z_i$  und  $z_{h'} = \min_i z_i$ . Daher gilt:

$$\max_i z_i - \min_i z_i \leq \mathcal{T}(W) (\max_i w_i - \min_i w_i) \quad . \quad (2.22)$$

Die Eigenschaft (2.22) läßt sich problemlos auf  $W^n$  übertragen. Wählt man nun für  $\mathbf{z}$  die  $k$ te Zeile von  $W^n$ , erhält man mit  $\max_i z_i$  und  $\min_i z_i$  die oben definierten  $M_k(n)$  bzw.  $m_k(n)$  und mit (2.22) dann die Eigenschaft

$$M_k((\nu + 1)n) - m_k((\nu + 1)n) \leq \mathcal{T}(W^n) (M_k(\nu n) - m_k(\nu n)) \quad . \quad (2.23)$$

Verwendet man nun die Definition von  $\kappa$  (2.7), dann ist  $\mathcal{T}(W^{(\kappa+k)}) < 1$  für alle  $k \geq 0$ . Durch wiederholtes Anwenden von (2.23) wird:

$$\begin{aligned} & M_k((\nu+1)\kappa) - m_k((\nu+1)\kappa) \\ & \leq \mathcal{T}(W^n)(M_k(\nu n) - m_k(\nu n)) \\ & \leq \mathcal{T}^2(W^n)(M_k((\nu-1)n) - m_k((\nu-1)n)) \\ & \leq \mathcal{T}^\nu(W^n)(M_k(n) - m_k(n)) \quad . \end{aligned} \quad (2.24)$$

Wegen  $\mathcal{T} < 1$  wird die Differenz zwischen Maximum und Minimum in den einzelnen Reihen der Matrix  $W$  also nach und nach abnehmen. In einer etwas weniger strengen Schreibweise kann man diese ‘Grenzmatrix’ dann mit  $W^\infty$  notieren und es gilt:

$$\left. \begin{aligned} W_{(ki)}^\infty &= W_{(kj)}^\infty \quad \text{für alle } i, j \\ (WW^\infty)_{(kl)} &= (W^\infty W)_{(kl)} \\ \sum_i W_{(ik)} &= 1 \end{aligned} \right\} \begin{aligned} (WW^\infty)_{(kl)} &= \sum_i W_{(ki)}^\infty W_{(il)} \\ &= W_{(kj)}^\infty \sum_i W_{(ik)} \\ &= W_{(kj)}^\infty \quad \text{für alle } l, j \quad . \end{aligned} \quad (2.25)$$

Damit ist nun klar, daß die Matrix konvergiert und wie die Matrix aussieht, gegen die sie konvergiert:

$$W^\infty = \begin{pmatrix} \tilde{w}_1 & \tilde{w}_1 & \cdots & \tilde{w}_1 \\ \tilde{w}_2 & \tilde{w}_2 & \cdots & \tilde{w}_2 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ \tilde{w}_N & \tilde{w}_N & \cdots & \tilde{w}_N \end{pmatrix} \quad . \quad (2.26)$$

Mit der Mikroreversibilität (2.8) ist dann  $\sum_i \hat{p}_i \tilde{w}_l = \sum_i \hat{p}_l \tilde{w}_i$  und das bedeutet zusammen mit (2.5)  $\tilde{w}_i = \hat{p}_i$ . Die Eigenvektoren von  $W^\infty$  sind leicht gefunden:

$$\begin{pmatrix} \hat{p}_1 \\ \hat{p}_2 \\ \hat{p}_3 \\ \vdots \\ \hat{p}_N \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ -1 \\ \vdots \\ 0 \end{pmatrix}, \dots, \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ \vdots \\ -1 \end{pmatrix} \quad (2.27)$$

mit den Eigenwerten  $1, 0, 0, \dots, 0$ . Wegen (2.25)  $WW^\infty = W^\infty$  ist der erste Eigenvektor auch Eigenvektor von  $W$ .

Damit ist gezeigt: Die Markov-Matrix konvergiert, sofern sie die *accessibility assumption* (2.7) erfüllt, gegen eine Matrix, die unabhängig von den Anfangsbedingungen eine Wahrscheinlichkeitsverteilung gemäß der *detailed balance* (2.8) produziert. Diese Eigenschaft begründet Monte-Carlo als numerisches Verfahren: Sind Bedingung (2.7) und (2.8) erfüllt, konvergiert die Verteilung der Zustände immer gegen die in *detailed balance* (2.8) verwendete Verteilung.

## Korrelationszeit

Zunächst sollen die oben erhaltenen Resultate noch weiter ausgebaut werden: Es ist klar, daß die Matrix  $W$  einen Eigenwert 1 hat. Welche Eigenwerte hat sie außerdem? *Rayleigh's Theorem* [8] sagt, daß das Produkt  $|\mathbf{u}W\mathbf{u}|$  für  $|\mathbf{u}| = 1$  maximiert wird durch den Eigenvektor zum größten Eigenwert. Da die Eigenvektoren senkrecht aufeinander stehen, muß jeder

Eigenvektor  $\neq \hat{\mathbf{p}}$  negative Elemente enthalten. Da aber  $W$  nur nicht-negative Elemente besitzt, kann  $|\mathbf{u}\mathbf{W}\mathbf{u}|$  niemals mit einem Vektor mit negativen Elementen maximal werden. Also wird  $|\mathbf{u}\mathbf{W}\mathbf{u}|$  durch  $\hat{\mathbf{p}}$  maximiert und daher ist der größte Eigenwert 1. Alle anderen Eigenwerte  $\lambda_i$  sind  $\lambda_i \leq 1$ . Und sie sind sogar echt kleiner als 1, weil der größte Eigenwert einer positiven Matrix nicht entartet sein kann, also  $\lambda_i < 1$ .

Nun soll die Korrelationszeit  $\tau$  eingeführt werden. Dazu wird zunächst die Autokorrelationsfunktion definiert. Sie lautet für eine Observable  $A$  [84, 85]:

$$\phi_{AA}(t) = \frac{\langle A(0)A(t) \rangle - \langle A \rangle^2}{\langle A^2 \rangle - \langle A \rangle^2} . \quad (2.28)$$

wobei  $\langle A(0)A(t) \rangle$  bedeutet, daß über das Produkt der Observable zu einem Zeitpunkt und  $t$  Zeitschritte später gemittelt werden soll. Die Normierung sorgt für  $\phi_{AA}(0) = 1$ . Weil  $\lim_{t \rightarrow \infty} \langle A(0)A(t) \rangle = \langle A(0) \rangle \langle A(t) \rangle$  ist  $\lim_{t \rightarrow \infty} \phi_{AA}(t) = 0$ . Erwartet man für  $\phi_{AA}(t)$  einen exponentiellen Abfall, also  $\phi_{AA}(t) = e^{-t/\tau}$ , dann ist  $\tau \approx \sum_0^\infty \phi_{AA}(t)$ .

Die genaue Analyse der Frage, wie  $\tau$  und die Eigenwerte der Matrix zusammenhängen, ist recht ermüdend und das Ergebnis liegt auf der Hand: die Korrelationszeit wird vom größten Eigenwert bestimmt, der kleiner ist als 1. Jedoch tauchen die verschiedenen Eigenwerte in  $\phi_{AA}(t)$  in der Form  $\sum_i a_i e^{-t/\tau_i}$  auf, und es ist dann auch

$$\tau_{eff} \approx \sum_0^\infty \phi_{AA}(t) \approx \sum_i \tau_i a_i \quad (2.29)$$

Da die  $a_i$  mit  $\sum_i a_i = 1$  von der Observablen abhängen, wird man daher für verschiedene Observablen auch verschiedene effektive Korrelationszeiten messen.

## 2.2 Monte-Carlo-Algorithmen

In den folgenden Abschnitten werden die Algorithmen vorgestellt, die in dieser Arbeit Verwendung fanden. Es wurde darauf verzichtet, den gesamten Code aufzulisten, da das gesamte Paket etwa 40.000 Zeilen umfaßt.

Zunächst jedoch noch einige allgemeine Grundlagen zu Monte-Carlo.

### 2.2.1 Allgemeines

Oben wurde bereits dargestellt, daß mit der *detailed balance* (2.8) sichergestellt werden kann, daß eine Folge von Potenzen einer Wahrscheinlichkeitsmatrix gegen eine andere konvergiert. Für den expliziten Fall der Boltzmann-Verteilung läßt sich (2.8) umschreiben:

$$\frac{W(\sigma \rightarrow \sigma')}{W(\sigma' \rightarrow \sigma)} = \frac{\hat{p}_{\sigma'}}{\hat{p}_{\sigma}} = e^{-\beta(E_{\sigma'} - E_{\sigma})} , \quad (2.30)$$

wobei  $E_{\sigma}$  die Energie des Zustand  $\sigma$  bezeichnet und  $W(\sigma \rightarrow \sigma')$  die Übergangswahrscheinlichkeit vom Zustand  $\sigma$  zu  $\sigma'$ .

Anhand der **Mastergleichung** [85] liest man sofort ab, daß die *detailed balance* die Wahrscheinlichkeit  $\hat{p}_{\sigma'}(t)$  zeitlich konstant werden läßt:

$$\frac{d}{dt} \hat{p}_{\sigma'}(t) = \sum_{\sigma'} W(\sigma' \rightarrow \sigma) \hat{p}_{\sigma'}(t) - W(\sigma \rightarrow \sigma') \hat{p}_{\sigma}(t) = 0 . \quad (2.31)$$

Eine solche Wahrscheinlichkeitsverteilung wird oft realisiert, indem mit einer **Auswahlwahrscheinlichkeit** oder *selection probability* eine neue Konfiguration erzeugt wird und mit der *acceptance probability* oder dem **acceptance ratio** [86] angenommen wird.

### Korrelationszeit

Wesentliches Qualitätsmerkmal von Monte-Carlo-Algorithmen ist ihre Korrelationszeit. Diese hängt wie bereits erwähnt von der betrachteten Observablen ab, jedoch natürlich auch vom Modell selbst. Man beobachtet darüberhinaus ein **critical slowing down**, bei dem die Korrelationszeit in der Nähe der kritischen Temperatur enorm ansteigt. Im thermodynamischen Limit divergiert sie mit dem dynamischen Exponenten  $z$  [86]:

$$\tau \propto |T - T_c|^{-\nu z} \quad . \quad (2.32)$$

Die bisher angegebene Korrelationszeit wird in sample-Anzahlen gemessen, also als Zahl von samples, die erzeugt werden muß, damit die Korrelationsfunktion (2.28) auf  $1/e$  abfällt. Bei sequentiellen Algorithmen, wie dem unten beschriebenen *Metropolis*- oder *Heatbath*-Verfahren heißen diese Zeitschritte auch **sweeps**. Diese Einheit ist allerdings für die Planung einer Simulation unbrauchbar, denn hier ist die CPU-Zeit die limitierte und limitierende Ressource, und es müssen möglichst viele unabhängige *samples pro CPU-Zeiteinheit* erzeugt werden. Am Ende dieses Kapitels sind einige Korrelationszeiten exemplarisch mit CPU-Zeiten aufgelistet (s. Tabelle 3.5).

### Veränderte Autokorrelationsfunktion

Die Definition (2.28) birgt eine gewisse Schwäche: Bezeichnet  $t_{max}$  die Zahl der erzeugten samples, dann gehen im ersten Term des Zählers die Werte der Observable  $A$  vom Zeitpunkt 1 bis  $t$  sowie  $t_{max} - t + 1$  bis  $t_{max}$  nur einmal ein, während sie im  $\langle A \rangle^2$  alle Werte zweimal eingehen. Bei langen Korrelationszeiten kann sich dieses Ungleichgewicht tatsächlich systematisch bemerkbar machen und man erhält starke Fluktuationen und sogar einige Werte  $\phi_{AA}(t) < 0$ . Gutmütiger verhält sich dagegen die Definition [87]

$$\phi_{AA}(t) = \frac{\langle A(0)A(t) \rangle - \langle A \rangle_0 \langle A \rangle_t}{\langle A^2 \rangle - \langle A \rangle^2} \quad (2.33)$$

mit

$$\langle A \rangle_0 = \frac{1}{t_{max} - t} \sum_{i=1}^{t_{max}-t} A_i \quad (2.34)$$

$$\langle A \rangle_t = \frac{1}{t_{max} - t} \sum_{i=1+t}^{t_{max}} A_i \quad . \quad (2.35)$$

Auch wenn sich diese modifizierte Definition bewährt hat, wird auch hier die Bedingung  $\phi_{AA}(t) \geq 0$ , wie man es sich erhoffen würde, nicht notwendig erfüllt.

### Unabhängige samples

Die Korrelationszeit  $\tau$  geht in die Berechnung der Fehler ein, wenn die Zahl der unabhängigen Samples abgeschätzt wird. Wenn  $N$  Samples mit einer Korrelationszeit  $\tau$  erzeugt wurden, dann ist die effektive Zahl unabhängiger Samples [85, 88]:

$$\tilde{N} = N/(2\tau + 1) \quad . \quad (2.36)$$

Der Schätzer für den Fehler des Schätzers des Mittelwertes  $\bar{A} = \sum_i^N A_i/N$  ist dann:

$$\Delta \bar{A} = \sqrt{s^2(\bar{A})} \quad (2.37)$$

wobei

$$s^2(\bar{A}) = \frac{1}{\tilde{N}(\tilde{N} - 1)} \sum (A_i - \bar{A})^2 \quad . \quad (2.38)$$

In Abschnitt 2.3 wird die Fehlerrechnung jedoch noch genauer besprochen.

### Anmerkungen zur Systemgröße

Die Grenzen einer Monte-Carlo-Simulation liegen in der Simulationszeit und damit vor allem in ihrer Systemgröße. Auf den ersten Blick skaliert die Laufzeit eines Algorithmus typischerweise mit dem Systemvolumen. Läßt man einmal außer acht, daß sich im FSS die Korrelationszeit mit dem Volumen verändert, ist das zumindest die Zahl der produzierten unabhängigen Samples betreffend einleuchtend. Jedoch ist das Maß für die Qualität einer Simulation nicht die Zahl der unabhängigen Samples, sondern der relative Fehler der ermittelten Schätzer der Mittelwerte. Für die Magnetisierungsdichte  $\langle M \rangle$  ist mit (2.36) dieser relative Fehler  $r$  [84] dann:

$$r = \left[ \frac{1}{\tilde{N}} \frac{\langle M^2 \rangle - \langle M \rangle^2}{\langle M \rangle^2} \right]^{1/2}. \quad (2.39)$$

Der Term  $f = (\langle M^2 \rangle - \langle M \rangle^2) / \langle M \rangle^2$  wird auch als **relative Fluktuation** bezeichnet. Sie kann stark von der Systemgröße abhängen und man klassifiziert mit  $f \propto L^{-x}$  wie folgt:

- $x = d$ : Starkes **self averaging** oder **Selbstmittelung**.
- $0 < x < d$ : *self averaging*
- $x = 0$ : Kein *self averaging*

Setzt man nun eine fest vorgegebene CPU-Zeit an, dann ist mit  $N \propto L^{-d}$  und  $\tau \propto L^{-z}$

$$r \propto L^{\frac{d+z-x}{2}}, \quad (2.40)$$

wobei für  $\tilde{N}$  wiederum (2.36) verwendet wurde. Es ist wegen  $d + z - x > 0$  klar, daß man große Systemgrößen möglichst vermeiden will. Neben der einfachen Notwendigkeit die *corrections to scaling* zu minimieren (s. 1.1.3), kann es jedoch im Falle der Verwendung eines Parallelcomputers auch Vorteile haben, große Systeme zu untersuchen, weil es günstiger werden kann, wenn mehr Prozessoren das Problem bei relativ kleineren Rändern gleichzeitig bearbeiten können.

### 2.2.2 Algorithmen

Nun sollen die Algorithmen diskutiert werden, die dazu verwendet wurden, die *samples* zu erzeugen. Man unterscheidet grundsätzlich zwischen **lokalen** und **Cluster-Algorithmen**. Erstere operieren sequentiell auf einzelnen Spins, die sie nach bestimmten Regeln verändern. Letztere bilden zunächst Cluster von Spins, auf denen sie dann eine kollektive Operation ausführen. Die lokalen Algorithmen weisen die Vorteile auf, sehr leicht an alle Modelle anpaßbar und ebenso leicht implementierbar zu sein. Ihr Nachteil gegenüber den Cluster-Algorithmen ist ihre typischerweise deutlich größere Korrelationszeit.

#### *Metropolis*

Der *Metropolis*-Algorithmus [89] ist der älteste und bekannteste Algorithmus und praktisch universell einsetzbar. Der Ablauf läßt sich wie folgt beschreiben [8]:

- Erzeuge für den Spin  $i$  (zufällig) eine neue Konfiguration

- Berechne die Energiedifferenz zwischen neuer Konfiguration ( $f$ ) und alter ( $i$ ),  $\Delta E = E_f - E_i$
- Akzeptiere die neue Konfiguration, wenn sie energetisch niedriger liegt, ansonsten akzeptiere sie mit Wahrscheinlichkeit  $P = e^{-\beta(\Delta E)}$

Der Algorithmus führt die oben beschriebenen Schritte sequentiell für alle Spins durch. Wenn alle Spins bearbeitet wurden, ist ein *sweep* abgeschlossen. Die Wahrscheinlichkeitsverteilung der neu ausgewählten lokalen Konfigurationen ist uniform, die Auswahlwahrscheinlichkeit also für alle globalen Konfigurationen gleich. Daher muß *detailed balance* nur für die *acceptance* ratio erfüllt sein. Wenn die Energiedifferenz bei der Bearbeitung des  $i$ ten Spins  $\Delta E_i$  ist, so ist die Wahrscheinlichkeit für eine bestimmte neue Konfiguration nach einem *sweep* unter Auslassung der Auswahlwahrscheinlichkeit

$$W(\Sigma \rightarrow \Sigma') = \prod_i^N \min(1, e^{-\beta(\Delta E_i)}) \quad , \quad (2.41)$$

wobei  $N$  die Zahl der Spins bezeichnet,  $\Delta E_i$  die Energiedifferenzen und  $\Sigma$  bzw.  $\Sigma'$  die Konfiguration vor bzw. nach dem sweep. Für den umgekehrten Vorgang ist dann

$$W(\Sigma' \rightarrow \Sigma) = \prod_i^N \min(1, e^{\beta(\Delta E_i)}) \quad . \quad (2.42)$$

Wegen

$$\frac{\min(1, e^{-\beta(\Delta E_i)})}{\min(1, e^{\beta(\Delta E_i)})} = e^{-\beta(\Delta E_i)} \quad (2.43)$$

ist mit

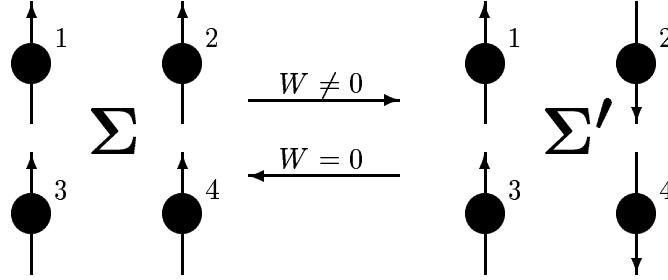
$$\frac{W(\Sigma \rightarrow \Sigma')}{W(\Sigma' \rightarrow \Sigma)} = e^{-\beta \sum_i^N \Delta E_i} \quad (2.44)$$

die *detailed balance* erfüllt.

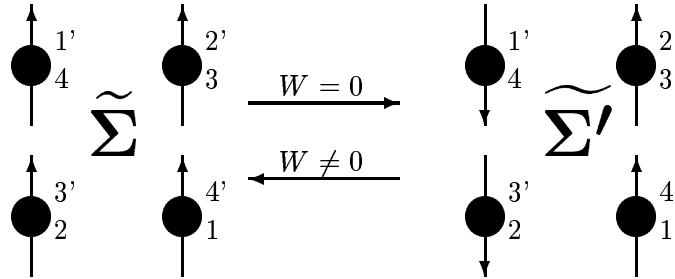
Offenbar erfordern (2.41) und (2.42) ein sequentielles Abarbeiten der Spins, damit die Wahrscheinlichkeiten eindeutig sind und nicht Summen über alle denkbaren Pfade. Dann aber werden im allgemeinen die  $\Delta E_i$  für den Hinweg und den Rückweg nicht mehr dieselben sein, was zur Folge hat, daß sich (2.43) nicht mehr kürzen läßt. Man kann das Problem auf die Spitze treiben, indem man die gängige Implementierung des *Metropolis*-Algorithmus für das *Ising*-Modell betrachtet. Statt die neuen lokalen Konfigurationen randomisiert auszuwählen, wird hier grundsätzlich der Flip vorgeschlagen. Damit wird der Algorithmus deterministisch für den Fall, daß ein Flip die Energie absenkt oder unverändert läßt, also  $\Delta E_i \leq 0$ . In Abb. 2.1 ist der Fall dargestellt, daß es eine endliche Wahrscheinlichkeit für die neue Konfiguration rechts gibt, aber keine Möglichkeit, in einem *sweep* von der rechten Konfiguration zur linken zu gelangen. Die eingezeichneten Nummern geben die Ordnung an, in der die Spins bearbeitet werden. Das Problem ist für den *Ising*-Fall nur besonders augenscheinlich, ganz allgemein greift (2.43) nur dann, wenn sich über und unter dem Bruchstrich die gleichen  $\Delta E_i$  befinden. Dennoch funktioniert der *Metropolis*-Algorithmus auch in der sequentiellen Variante. Dazu ist die *detailed balance* in

$$\frac{W(\Sigma \rightarrow \Sigma')}{W(\tilde{\Sigma}' \rightarrow \tilde{\Sigma})} = e^{-\beta(E_{\Sigma'} - E_{\Sigma})} \quad (2.45)$$

zu ändern, wobei  $\tilde{\Sigma}$  eine zu  $\Sigma$  äquivalente Konfiguration bezeichnet, bei der die Reihenfolge der Bearbeitung der Spins durch zweifaches Spiegeln invertiert ist, wie in Abb. 2.2<sup>4</sup> dargestellt. Man erspart sich diese Probleme, wenn man lokale Algorithmen als Einzelspin-Algorithmen betrachtet, bei denen nur alle  $N$  Evolutionsschritte eine Stichprobe der Observablen genommen wird.



**Abbildung 2.1:** Dargestellt sind vier *Ising*-Spins mit nächster-Nachbar-Wechselwirkung. Im sequentiellen halb-deterministischen *Metropolis*-Algorithmus ist die Übergangswahrscheinlichkeit für den Übergang von der linken zur rechten Konfiguration  $W \neq 0$ . Es ist jedoch unmöglich von der rechten in einem *sweep* zur linken Konfiguration zu gelangen, weil der erste Spin wegen  $\Delta E_1 = 0$  immer geflippt werden muß.



**Abbildung 2.2:** Durch zweifaches Spiegeln des Gitters ist die Reihenfolge der Abarbeitung der Spins für den Rückweg die umgekehrte Reihenfolge des Hinwegs. Die Wahrscheinlichkeit von rechts nach links überzugehen ist  $W \neq 0$ . Weil nach dem Umklappen des Spins 1' der Spin mit der Nummer 2' geflippt werden muß, ist die Wahrscheinlichkeit für den Übergang von links nach rechts nun  $W = 0$ .

## Heatbath

Der Heatbath-Algorithmus (HB) [70] ist ein weiterer lokaler, typischerweise sequentiell implementierter Algorithmus.<sup>5</sup> Der Unterschied zum *Metropolis*-Algorithmus besteht in

<sup>4</sup>Auf den ersten Blick ist es verwunderlich, daß in Abb. 2.1 der Weg von rechts nach links durch die lokale Konfiguration von Spin 1 versperrt ist und in Abb. 2.1 durch  $2' = 3$ . Bei genauerem Hinsehen findet man, daß in beiden Abbildungen  $2' = 3$  und  $4' = 1$  blockieren. Allgemein sollte sich zeigen lassen, daß  $W(\Sigma' \rightarrow \Sigma) = 0 \Leftrightarrow W(\tilde{\Sigma} \rightarrow \tilde{\Sigma}') = 0$ :  $W(\Sigma' \rightarrow \Sigma) = 0$  genau dann auftritt, wenn eine lokale Konfiguration in  $\Sigma'$  und  $\Sigma$  *gleich ist*, aber auf dem Weg  $\Sigma' \rightarrow \Sigma$  die umgeklappte Variante energetisch tiefer oder äquivalent liegt, also  $\Delta E \leq 0$ . Da die lokale Konfiguration in  $\Sigma'$  und  $\Sigma$  gleich ist, ist sie auch in  $\tilde{\Sigma}$  und  $\tilde{\Sigma}'$  gleich und es ist auch auf diesem Pfad  $\Delta E \leq 0$ , was dann auch hier für  $W(\tilde{\Sigma} \rightarrow \tilde{\Sigma}') = 0$  sorgt. Beide Pfade scheitern spätestens an exakt derselben lokalen Konfiguration.

<sup>5</sup>Bei den beiden hier vorgestellten lokalen Algorithmen kommt selbstverständlich auch eine randomisierte Reihenfolge bei der Bearbeitung der Spins in Frage.

erster Linie darin, daß neue Konfigurationen nicht erst erzeugt und dann akzeptiert oder abgelehnt werden, sondern gleich gemäß ihrer Wahrscheinlichkeitsverteilung erzeugt werden,

$$W(\Sigma \rightarrow \Sigma') = \frac{e^{-\beta E_{\Sigma'}}}{\sum_{\Sigma''} e^{-\beta E_{\Sigma''}}} \quad , \quad (2.46)$$

wobei die  $E_{\Sigma'}$  die innere Energie der Konfiguration  $\Sigma'$  bezeichnen. Diese Konfiguration unterscheidet sich von  $\Sigma$  nur durch die Veränderung in einem einzigen Spins, und daher erfolgt die Summation im Nenner auch über alle lokalen Konfigurationen eines einzigen Spins. Im Falle des 2D-*Ising* besteht die Summe beispielsweise aus nur zwei Termen. Da die  $E_{\Sigma'}$  von den jeweiligen lokalen Umgebungen des betrachteten Spins abhängen, ist insbesondere die Summe im Nenner ebenfalls von diesen Umgebungen abhängig. Im Algorithmus kann daher nicht einmal zu Beginn der Nenner berechnet werden, sondern muß immer wieder neu berechnet werden. Das führt zu gewissen numerischen Schwierigkeiten, die im Anhang A.1 eingehender diskutiert werden.

Der große Vorteil des Heatbath-Algorithmus findet sich schon in der obigen Darstellung der Wahrscheinlichkeit für eine neue Konfiguration  $\Sigma'$  (2.46), bei der die neue Orientierung des betroffenen Spins nicht von seiner alten abhängt. Daher sind deutlich kürzere Korrelationszeiten als im *Metropolis*-Algorithmus zu erwarten. Im Falle von *Ising*-Spins ist der Heatbath-Algorithmus dennoch unterlegen (s. Tabelle 3.5), weil er eine geringe Akzeptanz-Wahrscheinlichkeit hat (s. Abb. 2.4). Für  $n \geq 2$  (XY, *Heisenberg* etc.) gewinnt er aber gegenüber dem *Metropolis*-Algorithmus.

Daß der HB-Algorithmus die *accessibility assumption* erfüllt, ist klar, da in einem einzigen *sweep* jede andere Konfiguration erreichbar ist. Auch die *detailed balance* ist mit (2.46) auf die gleiche Weise erfüllt und problematisiert (die Normierungen müssen sich wegheben) wie beim *Metropolis*-Algorithmus.

### Swendsen-Wang-Algorithmus

Der *Swendsen-Wang*-, kurz SW-Algorithmus [90, 91], ist der Prototyp der Cluster-Algorithmen. Statt lokal auf den Spins zu operieren, werden alle *bonds* bearbeitet. In Abhängigkeit von ihrem augenblicklichen Beitrag zur totalen inneren Energie wird ein bond zwischen zwei Spins  $\mathbf{S}_i$  und  $\mathbf{S}_j$  mit einer bestimmten Wahrscheinlichkeit „aktiviert“:

$$P = 1 - \exp(\min\{0, -2J\beta \mathbf{S}_i \mathbf{S}_j\}) \quad , \quad (2.47)$$

Das bedeutet, daß für  $J > 0$  nur *bonds* zwischen gleich orientierten Spins möglich sind. Die aktivierten *bonds* bilden nun Cluster auf dem Gitter und für diese Cluster wird nun zufällig eine neue Konfiguration erzeugt. *Detailed balance* und *accessibility assumption* sind für diesen Algorithmus erfüllt [90].

Der wichtigste Nachteil dieses Algorithmus: Er ist nur auf *Potts*-Modelle anwendbar. Das umfaßt immerhin das *Ising*-Modell als 2-state-*Potts*-Modell. Dennoch ist sein Anwendungsbereich extrem eingeschränkt was insofern sehr bedauerlich ist, als daß die Korrelationszeit bei diesem Algorithmus in LTP wie in HTP auf einen Bruchteil der Korrelationszeit der lokalen Algorithmen abfällt.

### Wolff-Algorithmus

Der *Wolff*-Algorithmus [92, 93] beruht auf dem SW-Algorithmus. Auch er aktiviert *bonds* im Gitter mit der o.g. Wahrscheinlichkeit, sucht dann aber zufällig einen Cluster heraus

und führt auf ihm eine Symmetrie-Operation  $R$  aus. Die Operation  $R$  ist in [92] explizit als Spiegelung angegeben, aber zur Erfüllung von *detailed balance* und *accessibility assumption* ist es zunächst lediglich notwendig, daß mit der Operation  $R$  jede lokale Spinkonfiguration erreichbar ist und daß  $R^2 = 1$ .

Von besonderer Bedeutung ist, daß die Anwendung des *Wolff*-Algorithmus' nicht auf *Potts*-Modelle beschränkt ist. Mit entsprechender Wahl von  $R$ , nämlich Spiegelung der Spin-Orientierung an einer zufälligen Ebene und zufälliger Spiegelungs- oder Identitätsoperation auf derjenigen der Chiralitätsvariablen, ist es sogar möglich, den *Wolff*-Algorithmus auf das Stiefel-Modell anzuwenden. Daneben verfügt der *Wolff*-Algorithmus über einen ***improved estimator*** [93] für die Korrelationsfunktion.

In einer realen Implementierung wird der *Wolff*-Algorithmus selbstverständlich nicht erst das gesamte Gitter in Cluster einteilen, um dann nur eines der Cluster zu flippen. Er sucht stattdessen zunächst einen Spin und entwickelt das Cluster um diesen herum.

In HTP wird der *Wolff*-Algorithmus nach und nach ineffizient, weil das Cluster allmählich zu klein wird. Umgekehrt wird der SW-Algorithmus vor allem bei großen Gittern in LTP ineffizient, weil er einen erhöhten Verwaltungsaufwand betreibt, um das gesamte Gitter in Cluster zu zerlegen, und doch im wesentlichen nur einen sehr großen Cluster flippt. Der Hauptanwendungsbereich für den SW-Algorithmus ist daher HTP, der des *Wolff*-Algorithmus LTP. Allerdings ist der Vorteil des SW-Algorithmus gegenüber dem *Wolff*-Algorithmus in HTP typischerweise etwas größer als umgekehrt der des *Wolff*-Algorithmus gegenüber dem SW-Algorithmus in LTP.

### Korrelationszeiten exemplarisch

Die folgende Tabelle gibt die Korrelationszeiten von  $M$  und  $E$  in einem  $100 \times 100$  Spins großen 2D-*Ising* in LTP ( $T = 2.2$ ) und in HTP ( $T = 2.4$ , jedoch  $100 \times 100$ ) an. Zu beachten ist insbesondere die Spalte ganz rechts, die die größere Korrelationszeit normiert auf einen Spin in realer CPU-Zeit angibt, um die effektive Leistung der Algorithmen abzuschätzen.

Man erkennt, daß die Cluster-Algorithmen deutlich im Vorteil sind. Der Vorsprung des *Wolff*-Algorithmus in LTP gegenüber dem SW-Algorithmus ist tatsächlich etwas geringer, jedoch hängen die Verhältnisse natürlich auch davon ab, wie weit von der kritischen Temperatur entfernt die Simulation durchgeführt wird. Für das Beispiel wurden die Temperaturen so gewählt, daß  $L \approx 10\xi$ .

| Algorithmus          | $T$  | Größe            | CPU-Zeit/ $\mu s$ | $\tau_M$ | $\tau_E$ | $\tau_r/\mu s$ |
|----------------------|------|------------------|-------------------|----------|----------|----------------|
| <i>Metropolis</i>    | 2.20 | $100 \times 100$ | 1.496             | 24.23    | 8.05     | 36.25          |
| <i>Heatbath</i>      | 2.20 | $100 \times 100$ | 1.669             | 50.36    | 13.28    | 84.05          |
| <i>Wolff</i>         | 2.20 | $100 \times 100$ | 1.788             | 2.43     | 2.75     | 4.92           |
| <i>Swendsen-Wang</i> | 2.20 | $100 \times 100$ | 3.205             | 3.57     | 3.87     | 12.40          |
| <i>Metropolis</i>    | 2.40 | $100 \times 100$ | 1.508             | 33.75    | 6.31     | 50.90          |
| <i>Heatbath</i>      | 2.40 | $100 \times 100$ | 1.708             | 93.20    | 11.26    | 159.19         |
| <i>Wolff</i>         | 2.40 | $100 \times 100$ | 0.521             | 6.23     | 66.76    | 34.78          |
| <i>Swendsen-Wang</i> | 2.40 | $100 \times 100$ | 3.281             | 1.20     | 2.91     | 9.55           |

**Tabelle 2.1:** Die Korrelationszeiten verschiedener Algorithmen. Die Angaben  $\tau_M$  und  $\tau_E$  sind in sweeps, die Angabe  $\tau_r$ , die maximale Korrelationszeit multipliziert mit der CPU-Zeit in  $\mu s$  (auf einem i586-200). Die CPU-Zeit ist normiert auf einen *sweep* und einen Spin. Die Angaben über die Gittergröße dienen daher nur der Vollständigkeit. Die Werte dienen lediglich der Orientierung, welcher Algorithmus zu verwenden ist, Angaben zum Fehler erübrigen sich daher.

### 2.2.3 Erzeugung von Zufallszahlen

Zufallszahlen werden an zwei Stellen verwendet: Zum einen zur Erzeugung neuer Konfigurationen, zum anderen bei der Akzeptanz mit Wahrscheinlichkeit. Da Computer deterministische Geräte sind, werden Zufallszahlen ebenfalls auf deterministische Weise erzeugt. Natürlich ist es von großer Bedeutung, daß die Pseudo-Zufallszahlen „so zufällig wie möglich“ verteilt sind, Kriterien dazu sind in [94, 95] angegeben. Jedoch zeigen selbst sehr ausgefeilte, moderne Zufallszahlengeneratoren mitunter überraschende systematische Fehler [96]. Als guter Kompromiß zwischen Qualität und Performance wurde `rand1` aus [94] gewählt.

## 2.3 Fehlerrechnung: Der Jackknife

Neben der Ermittlung von Schätzwerten für die gesuchten Observablen ist es von fundamentaler Bedeutung den Fehler der Schätzungen abzuschätzen.

Die Monte-Carlo Simulation erzeugt eine Stichprobe bestehend aus Konfigurationen. Die Observablen werden für jedes Element dieser Stichprobe, also für jede Konfiguration berechnet. Aus der Stichprobe ergeben sich **Schätzer der Mittelwerte der Observablen**. An dieser Stelle ist es wichtig, zwischen Schätzer eines Mittelwertes  $\tilde{x}$  und exaktem Erwartungswert  $\langle x \rangle$  zu unterscheiden. Ein Schätzer heißt *unbiased*, wenn für beliebige Stichprobengrößen der Erwartungswert des Schätzers den exakten Erwartungswert erzeugt:  $\langle \tilde{x} \rangle = \langle x \rangle$ . Ein Schätzer heißt **konsistent**, wenn seine Varianz mit der Stichprobengröße  $n$  verschwindet [97]:

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \sigma(\tilde{x}) = 0 \quad . \quad (2.48)$$

Die natürliche Definition des Schätzers des Mittelwertes auf Grundlage einer Stichprobe  $\{(x)_1, (x)_2, \dots, (x)_N\}$  der Größe  $N$ ,

$$\tilde{x} = \frac{1}{N} \sum_i^N (x)_i \quad (2.49)$$

ist *unbiased* und konsistent, wobei die Schätzer der Standard-Abweichung oder des Standard-Fehlers des Schätzers bereits in (2.37) angegeben wurde:

$$\Delta \tilde{x} = \sqrt{s^2(\tilde{x})} \quad , \quad (2.50)$$

wobei

$$s^2(\tilde{x}) = \frac{1}{\tilde{N}(\tilde{N} - 1)} \sum_i^N ((x)_i - \tilde{x})^2 \quad (2.51)$$

mit  $\tilde{N}$  als Zahl unabhängiger samples. Dieser Schätzer der Varianz ist selbst unbiased. Als Abschätzung des Fehlers ist die Varianz insofern geeignet, als daß im Falle einer *Gauß*-Verteilung der wahre Wert der gesuchten Größen mit einer Wahrscheinlichkeit von 68.3% in einem Intervall von plus/minus einer Standardabweichung um den Schätzwert herum liegt und im allgemeinen Fall über die Tschebyscheff-Ungleichung [98] mit einer Wahrscheinlichkeit von 75% in einem Intervall von plus/minus zwei Standardabweichungen.

Komplizierter wird die Berechnung des Schätzers für eine Funktion von Erwartungswerten. Als erste Näherung läßt sich **Gauß**-Fehlerrechnung verwenden:

$$\Delta f = \sum_i^n \left| \frac{\partial f}{\partial a} \right| \Delta \tilde{a} + \left| \frac{\partial f}{\partial b} \right| \Delta \tilde{b} + \dots + \left| \frac{\partial f}{\partial z} \right| \Delta \tilde{z} \quad (2.52)$$

für eine Funktion  $f(a, b, \dots, z)$  von Mittelwerten  $\tilde{a}, \tilde{b}$  bis  $\tilde{z}$  mit Fehlern  $\Delta\tilde{a}, \Delta\tilde{b}$  usw. Die **Gauß'sche** Fehlerrechnung erzeugt jedoch deutliche Artefakte, wenn die Kovarianzen der Mittelwerte nicht verschwinden. Ein triviales Beispiel ist  $f(a, b) = a - b$ . Der Schätzer für den Fehler von  $f(\tilde{a}, \tilde{a})$  ist dann  $2\Delta\tilde{a}$  statt 0.

Eine Alternative bietet **subsampling**. Dabei werden systematisch Untermengen der erzeugten Samples erzeugt und über diese Subsamples die Varianz des Schätzers der Funktion geschätzt.<sup>6</sup> Die einfachste Variante des *subsamplings* ist der **Jackknife** [99]. Zunächst wird ein neuer Schätzer der Funktion angegeben:

$$\langle f \rangle_J = \frac{1}{N} \sum_i^N f((a)_{Ji}, (b)_{Ji}, \dots, (z)_{Ji}) \quad , \quad (2.53)$$

wobei  $N$  die Zahl der Samples bezeichnet und  $\langle f \rangle_J$  den Jackknife-Schätzer der Funktion  $f(\langle a \rangle, \langle b \rangle, \dots, \langle z \rangle)$  der wahren Erwartungswerte. Die  $(a)_{Ji}$  bezeichnen die Schätzer für die Mittelwerte  $\langle a \rangle$  auf Grundlage des Subsamples  $i$ . Diese Subsamples werden erzeugt, indem das  $i$ te Element aus dem Sample entfernt wird. Der Schätzer  $(a)_{Ji}$  für einen Mittelwert auf Grundlage dieses neuen Samples ist dann einfach

$$(a)_{Ji} = \frac{1}{N-1} \sum_{j \neq i} (a)_j = \frac{N\tilde{a} - (a)_i}{N-1} \quad . \quad (2.54)$$

Die Varianz wird nun geschätzt, indem direkt der Einfluß des  $i$ ten Samples auf das Gesamtergebnis berechnet wird. Der Jackknife-Schätzer für die Varianz der Funktion lautet [100]:

$$(s^2(f))_J = \frac{N-1}{\tilde{N}} \sum_i^N (\langle f \rangle_J - f((a)_{Ji}, (b)_{Ji}, \dots, (z)_{Ji}))^2 \quad . \quad (2.55)$$

Man beachte den gegenüber (2.51) veränderten Vorfaktor. Für  $f(x) = x$  erhält man durch Einsetzen von (2.54) in (2.55) die alte Beziehung (2.51). Der Vorteil des hier angegebenen **Jackknife-estimator** ist, daß sein Bias maximal  $\propto N^{-1}$  ist [100]:

$$\text{bias}(\langle f \rangle_J) = \langle f \rangle - \langle \langle f \rangle_J \rangle \quad (2.56)$$

$$= \frac{c_f}{N-1} + \frac{c_f^2}{N-1} + \mathcal{O}(N^{-3}) \quad , \quad (2.57)$$

wobei  $\langle f \rangle = f(\langle a \rangle, \langle b \rangle, \dots, \langle z \rangle)$ .

Alle Subsampling-Methoden sind sehr datenintensiv, weil die ursprüngliche Stichprobe unter Verwendung von (2.54) um ein Vielfaches aufgebläht wird. Die direkte Verwendung der hier angegebenen Formeln würde es erforderlich machen, alle Observablen der erzeugten Samples zu speichern. Das sind pro Sample bei einem Stiefel-Modell  $2 \times 8$  Byte für den XY-Ordnungsparameter, 4 Byte für den ganzzahligen *Ising*-Ordnungsparameter und weitere 8 Byte für die Energie. Bei drei Millionen erzeugten Samples bedeutet das ein Datenvolumen von 80 MByte, das für jede Simulation erzeugt werden muß. Es sind daher in erster Linie praktische Erwägungen, die Schätzer für kompliziertere Funktionen durch höhere Momente der Observablen auszudrücken. Das dadurch erzeugte Bias ist maximal  $\mathcal{O}(N^{-2})$ .

---

<sup>6</sup>Eine etwas gängigere Methode des *subsampling* ist **binning**, bei dem die Stichprobe in disjunkte Teilmengen zerlegt wird und anhand der Streuung der Schätzer auf Basis der Teilmengen der Fehler abgeschätzt wird.

Als Beispiel für eine Abschätzung dieser Form, hier zunächst im Detail der Jackknife-estimator für  $f(\langle x \rangle, \langle y \rangle)$  mit  $f(x, y) = xy$ . Es ist mit (2.53) und (2.54):

$$\langle f \rangle_J = \frac{1}{N} \sum_i^N f((x)_{Ji}, (y)_{Ji}) \quad (2.58)$$

$$= \frac{1}{N} \sum_i^N (x)_{Ji} (y)_{Ji} \quad (2.59)$$

$$= \frac{1}{N} \sum_i^N \frac{N\tilde{x} - (x)_i}{N-1} \frac{N\tilde{y} - (y)_i}{N-1} \quad (2.60)$$

$$= \frac{1}{N} \sum_i^N \frac{(N-1)^2 \tilde{x}\tilde{y} + (N-1)(\tilde{x}(\tilde{y} - (y)_i) + \tilde{y}(\tilde{x} - (x)_i))}{(N-1)^2} \quad (2.61)$$

$$+ \frac{(\tilde{x} - (x)_i)(\tilde{y} - (y)_i)}{(N-1)^2} \\ = \tilde{x}\tilde{y} + \frac{1}{N} \sum_i^N \frac{2\tilde{x}\tilde{y} - \tilde{x}(y)_i - \tilde{y}(x)_i}{N-1} + \frac{1}{N} \sum_i^N \frac{\tilde{x}\tilde{y} - \tilde{x}(y)_i - \tilde{y}(x)_i + (x)_i(y)_i}{(N-1)^2} \quad (2.62)$$

$$= \tilde{x}\tilde{y} + \frac{\tilde{x}\tilde{y} - \tilde{x}\tilde{y}}{(N-1)^2} \quad (2.63)$$

Entsprechend mit (2.55) die Berechnung der Varianz. So findet man für  $(s^2(f))_J$  für  $f(x, y) = x + y$

$$(s^2(f))_J = \frac{1}{N-1} \left( (\tilde{x}^2 - \tilde{x}^2) + (\tilde{y}^2 - \tilde{y}^2) + 2(\tilde{x}\tilde{y} - \tilde{x}\tilde{y}) \right) \quad (2.64)$$

und damit für  $(s^2(f(a, -a)))_J = 0$ , wie es im obigen Beispiel der naiven Methode nicht erfüllt war.

Weitere Ergebnisse finden sich im Anhang des Artikels [101] über das **Ising**-Modell auf einem fraktalen Gitter. Das wichtigste Ergebnis in diesem Anhang sind die Gleichungen für allgemeine Polynome in Mittelwerten:

$$F(x_1, x_2, \dots, x_\nu) = \sum_{i_1 i_2 \dots i_\nu} a_{i_1 i_2 \dots i_\nu} x_1^{i_1} x_2^{i_2} \dots x_\nu^{i_\nu} \quad (2.65)$$

$$H(x_1, x_2, \dots, x_\nu) = \sum_{i_1 i_2 \dots i_\nu} b_{i_1 i_2 \dots i_\nu} x_1^{i_1} x_2^{i_2} \dots x_\nu^{i_\nu} \quad (2.66)$$

wobei die  $x_i$  nun verschiedene Observablen bezeichnen. Um beispielsweise den Jackknife-estimator für  $\langle ME \rangle - \langle M \rangle \langle E \rangle$  zu berechnen, wäre wie folgt zu identifizieren

$$\begin{aligned} ME &\rightarrow x_1 \\ M &\rightarrow x_2 \\ E &\rightarrow x_3 \end{aligned}$$

und entsprechend

$$\begin{aligned} a_{100} &= 1 \\ a_{011} &= 1 \\ a_{ijk} &= 0 \quad \text{sonst} \end{aligned} \quad (2.67)$$

Solche „Felder“ sind natürlich für den Einsatz auf dem Computer prädestiniert. Das Resultat für den Schätzer für  $F$  bzw.  $F/H$  als Funktion von Erwartungswerten ist dann:

$$\langle F \rangle_J = \tilde{F} = F(\tilde{x}_1, \tilde{x}_2, \dots, \tilde{x}_\nu) + \mathcal{O}(N^{-2}) \quad (2.68)$$

$$\left\langle \frac{F}{H} \right\rangle_J = \frac{\tilde{F}}{\tilde{H}} + \mathcal{O}(N^{-2}) \quad (2.69)$$

und für die Varianz

$$s^2(F)_J = \frac{1}{N} \sum_{\substack{i_1 i_2 \dots i_\nu \\ i'_1 i'_2 \dots i'_\nu}} a_{i_1 i_2 \dots i_\nu} a_{i'_1 i'_2 \dots i'_\nu} \tilde{x}_1^{(i_1+i'_1)} \tilde{x}_2^{(i_2+i'_2)} \dots \tilde{x}_\nu^{(i_\nu+i'_\nu)} \quad (2.70)$$

$$\begin{aligned} & \cdot \sum_{\substack{\kappa=1,2,\dots,\nu \\ \lambda=1,2,\dots,\nu}} i_\kappa i'_\lambda \frac{\widetilde{x_{i_\kappa} x_{i'_\lambda}} - \widetilde{x_{i_\kappa}} \widetilde{x_{i'_\lambda}}}{\widetilde{x_{i_\kappa}} \widetilde{x_{i'_\lambda}}} \\ & + \mathcal{O}(N^{-2}) \\ s^2(F/H)_J &= \frac{\tilde{H}^2 s^2(F)_J + \tilde{F}^2 s^2(H)_J}{\tilde{H}^4} \end{aligned} \quad (2.71)$$

$$\begin{aligned} & - 2 \frac{1}{N} \sum_{\substack{i_1 i_2 \dots i_\nu \\ i'_1 i'_2 \dots i'_\nu}} b_{i_1 i_2 \dots i_\nu} a_{i'_1 i'_2 \dots i'_\nu} \tilde{x}_1^{(i_1+i'_1)} \tilde{x}_2^{(i_2+i'_2)} \dots \tilde{x}_\nu^{(i_\nu+i'_\nu)} \\ & \cdot \sum_{\substack{\kappa=1,2,\dots,\nu \\ \lambda=1,2,\dots,\nu}} i_\kappa i'_\lambda \frac{\widetilde{x_{i_\kappa} x_{i'_\lambda}} - \widetilde{x_{i_\kappa}} \widetilde{x_{i'_\lambda}}}{\widetilde{x_{i_\kappa}} \widetilde{x_{i'_\lambda}}} \\ & + \mathcal{O}(N^{-2}) \end{aligned} \quad (2.72)$$

Der Beweis dieser Gleichungen befindet sich in Anhang B.

## 2.4 FSS

Das bereits in 1.1.3 erwähnte **finite size scaling** (FSS) stellt die wichtigste und überaus genaue Methode zur Bestimmung kritischer Exponenten dar. FSS wurde in dieser Arbeit *nicht* verwendet, findet aber Erwähnung, weil es sich um eine Standard-Methode handelt, und einige Resultate im Kontrast zur Methode des FSS stehen.

Die Theorie des FSS geht auf die Renormierungsgruppe zurück [102]. Ähnlich wie in (1.34) wird für den singulären Teil der Freien Energiedichte

$$f(L, t, h) = b^{-d} f(b^{-1} L, b^{y_t} t, b^{y_h} h) \quad (2.73)$$

angesetzt, wobei  $L$  die Systemgröße und  $b$  der Skalenfaktor. Der Vorfaktor  $b^{-d}$  ist auf die höhere Dichte im renormierten System zurückzuführen. Fundamental bei diesem Ansatz ist das erste Argument von  $f$ : Setzt man nun nämlich  $b = L$ , dann wird

$$f(L, t, h) = L^{-d} \Phi(L^{y_t} t, b^{y_h} h) \quad (2.74)$$

mit einer neuen Funktion  $\Phi(t, h) \equiv f(1, t, h)$ . Setzt man nun die Ergebnisse aus Abschnitt 1.1.4 ein, findet man bei  $h = 0$  und  $t = 0$  mit  $\chi \propto \frac{\partial^2 f}{\partial h^2} \Big|_t$  und (1.38)

$$\chi \propto L^{\gamma_t} \quad (2.75)$$

oder mit  $y_t = 1/\nu$

$$\chi \propto L^{\gamma/\nu} \quad . \quad (2.76)$$

Entsprechend ergibt sich für andere thermodynamische Größen

$$c_v \propto L^{\alpha/\nu} \quad (2.77)$$

$$\langle M \rangle \propto L^{-\beta/\nu} \quad (2.78)$$

$$\langle M^2 \rangle \propto L^{\gamma/\nu} \quad (2.79)$$

$$\frac{\langle ME \rangle - \langle M \rangle \langle E \rangle}{\langle M \rangle} \propto L^{1/\nu} \quad . \quad (2.80)$$

Man kann diese Ergebnisse bereits mit folgendem, naiven Ansatz erhalten: Am kritischen Punkt wird das Verhalten des Systems von der divergierenden Korrelationslänge bestimmt. Diese ist jedoch durch die Systemgröße beschränkt. Ersetzt man nun in den Definitionen der kritischen Exponenten (1.24) - (1.27) den Term  $|T - T_c|$  wegen  $\xi \propto |T - T_c|^{-\nu}$  und  $\xi \rightarrow L$  durch den Term  $L^{-1/\nu}$ , dann erhält man ebenfalls das oben angegebene Skalenverhalten. Dieser Ansatz ist insofern unzureichend, als daß ihmzufolge das Skalenverhalten im gesamten FSS-Bereich (s. Abb. 1.4) voll zu sehen sein sollte. Das ist jedoch nicht der Fall. Abseits der kritischen Temperatur kommen deutliche Korrekturen zum Tragen. Der Ansatz in [103] wonach einfach  $\xi'/\xi = L'/L$  korrigiert diesen Ansatz. Wesentlich eleganter, jedoch physikalisch schwierig zu rechtfertigen ist der Ansatz in [39] wonach das Inverse der Systemgröße in einen Ansatz der Form (1.34) als relevante Skalenvariable mit Eigenwert 1 problemlos einzufügen ist, solange der Hamiltonian am Fixpunkt kurzreichweitig bleibt.

Eine besondere Bedeutung für das FSS haben diejenigen thermodynamischen Größen, die invariant gegenüber RG-Transformationen sind. Die wichtigste Größe dieser Art ist die *Binder*-Kummulante  $U$ :

$$U = 1 - \frac{\langle M^4 \rangle}{3\langle M^2 \rangle^2} \quad . \quad (2.81)$$

Am kritischen Punkt treten dann finite-size-corrections der Form [104]

$$U(L, T) = U^* + a_U(T - T_c)L^{1/\nu} + c_UL^{-\omega} + \dots \quad (2.82)$$

auf, wobei  $\omega$  die *correction to scaling* bezeichnet wie sie in 1.1.3 besprochen wurde. Wenngleich diese Korrekturen *alle* oben genannten Größen betreffen, sollen sie hier nicht weiter besprochen werden. Es ist jedoch klar, daß man auch im FSS kleine Systemgrößen zu vermeiden versuchen wird.

Betrachtet man nun die Schnittpunkte zweier Systeme mit Größen  $L_1$  und  $L_2$ , erhält man am Schnittpunkt  $T_s$  mit (2.82)

$$T_s - T_c = -\frac{c_U}{a_U} \frac{L_1^{-\omega} - L_2^{-\omega}}{L_1^{1/\nu} - L_2^{1/\nu}} \quad . \quad (2.83)$$

Diese Gleichung läßt sich zur Bestimmung von  $T_c$  annähern. Eine populäre, aber sehr ungefähre Näherung ist [105, 106, 107]

$$T_s - T_c = -\frac{c_U}{a_U} L_1^{-\omega-1/\nu} \frac{1 - \left(\frac{L_2}{L_1}\right)^{-\omega}}{1 - \left(\frac{L_2}{L_1}\right)^{-1/\nu}} = -\frac{c_U}{a_U} L_1^{-\omega-1/\nu} \nu \frac{1}{\ln(L_2/L_1)} (1 + \dots) \quad , \quad (2.84)$$

wobei  $1 - x^{1/\nu} \approx \frac{1}{\nu} \ln(x)$  und  $1 - x^{-\omega} = 1 + \dots$  verwendet wurde. Mit dieser Näherung ist es nun möglich, die Schnittpunkte eines Systems der Größe  $L_1$  mit verschiedenen Systemen der Größe  $L_2$  für  $L_2 \rightarrow \infty$  zu extrapolieren.

Typischerweise werden die FSS-Gleichungen (2.76)-(2.80) zum einen auf den Wert der thermodynamischen Größen bei  $T_c$  angewendet, also

$$\chi(T_c) \propto L^{\gamma/nu} \quad , \quad (2.85)$$

zum anderen auf die quasi-kritische Temperatur, bei denen die besprochenen Größen für die einzelnen endlichen Systemgrößen maximal werden, also

$$\chi(T_{\chi_{max}}) \propto L^{\gamma/nu} \quad . \quad (2.86)$$

### Histogramm-Methode

Es ist gerade in Zusammenhang mit dem FSS häufig notwendig, eine Simulation sehr genau bei einer bestimmten Temperatur durchzuführen, etwa um die oben erwähnten Schnittpunkte der Binder-Kummulante zu bestimmen. Eine Methode, die es erlaubt Simulationen zu extrapolieren und damit Aussagen über die Observablen bei theoretisch beliebigen  $T$  zu erhalten, ohne zeitaufwendig simulieren zu müssen, ist die **Histogramm-Methode** von *Ferrenberg* und *Swendsen* [108, 109]. Das Prinzip ist beeindruckend simpel. Der Erwartungswert für eine Observable bei  $\beta_0$  bzw.  $\beta$  ist gegeben durch

$$\langle A \rangle(\beta_0) = \sum_i p_i(\beta_0) A_i \quad (2.87)$$

$$\langle A \rangle(\beta) = \sum_i p_i(\beta) A_i \quad , \quad (2.88)$$

wobei die Summe über alle Zustände läuft. Die  $p_i$  sind gerade der *Boltzmann*-Faktor, also

$$\frac{p_i(\beta)}{p_i(\beta_0)} = \frac{e^{-E_i\beta} \sum_i e^{-E_i\beta_0}}{e^{-E_i\beta_0} \sum_i e^{-E_i\beta}} \quad (2.89)$$

$$= e^{-\Delta\beta E_i} \frac{\sum_i e^{-E_i\beta_0}}{\sum_i e^{-E_i\beta_0} e^{-\Delta\beta E_i}} \quad (2.90)$$

mit  $\Delta\beta = \beta - \beta_0$ . Wenn die  $p_i(\beta_0)$  bereits als Verteilung  $n_i$  bekannt sind, dann ist

$$p_i(\beta) = n_i e^{-\Delta\beta E_i} \frac{\sum_i n_i}{\sum_i n_i e^{-\Delta\beta E_i}} \quad . \quad (2.91)$$

Dieses  $p_i(\beta)$  kann nun dazu verwendet werden,  $\langle A \rangle(\beta)$  an theoretisch beliebigen Stellen zu berechnen.

Man wird in einer konkreten Realisierung die  $n_i$  nicht als Verteilung einzelner Konfigurationen realisieren, da praktisch jede Konfiguration nur einmal auftritt, müßte man dazu letztlich die Observablen aller *samples* zu speichern. Man verwendet stattdessen üblicherweise Histogramme, bei denen die Summation über die Observablen bei gleicher Energie bereits während der Simulation durchgeführt wird. Wenn  $I(E) = \{i_1, i_2, \dots, i_{n_E}\}$  die Indizes  $i$  der Samples mit Energie im Intervall  $[E, E + \Delta E]$  bezeichnen, dann läßt sich für den Schätzer des Erwartungswertes schreiben:

$$\langle A \rangle(\beta) \approx \sum_E \sum_{i \in I_E} A_i p_i \quad (2.92)$$

$$= \frac{\sum_E \left( \sum_{i \in I_E} A_i n_i \right) e^{-\Delta\beta E}}{\sum_E \left( \sum_{i \in I_E} n_i \right) e^{-\Delta\beta E}} \sum_i n_i \quad , \quad (2.93)$$

wobei die  $\sum_{i \in I_E}$  bereits während der Simulation durchgeführt werden können. Geht  $\Delta E \rightarrow 0$ , wie man es in kleinen, diskreten Systemen machen kann, wird (2.92) exakt.

Bei den  $\sum_i n_i e^{-\Delta \beta E}$  handelt es sich praktisch um Faltungen der simulierten Histogramme mit der *Boltzmann*-Verteilung und die Methode hat daher ihre natürlichen Grenzen dort, wo die Faltungssumme zu klein wird.

## 2.5 Dynamic scaling

Das *dynamic scaling* ist unmittelbar verwandt mit dem FSS. Während das FSS auf eine Begrenzung der Korrelationslänge durch die Gittergröße zurückgeführt werden kann, ist die Korrelationslänge im Falle des *dynamic scaling* durch die endliche Simulationszeit begrenzt.<sup>7</sup>

Über das kritische Verhalten der Korrelationszeit  $\tau \propto |T - T_c|^{-\nu z}$  und dem Übergang  $\tau \rightarrow t$ , wobei  $t$  nun die Simulationszeit als oberes Limit für die Korrelationszeit bezeichnet, findet man für  $|T - T_c|$  die Ersetzung  $t^{-1/(\nu z)}$ . Damit wird wie oben in (2.76) - (2.80)

$$\langle M \rangle(t) \propto t^{-\beta/(\nu z)} \quad (2.94)$$

$$\chi(t) \propto t^{\gamma/(\nu z)} \quad (2.95)$$

$$\langle M^2 \rangle(t) \propto t^{\gamma/\nu} \quad (2.96)$$

$$\frac{\langle M^2 \rangle(t)}{\langle M \rangle(t)^2} \propto t^{d/z} . \quad (2.97)$$

Neben diesem naiven Zugang, lassen sich die genannten Gleichungen ebenfalls auf Ergebnisse der Renormierungsgruppe gründen. Danach zeigen Algorithmen vom Typ **Modell A** [110], d.h. rein dissipative Relaxation, bereits im frühesten Stadium der Relaxation universelles kritisches Verhalten [111]. Vor allem *Zheng* hat diese Ergebnisse zur Bestimmung kritischer Exponenten verwendet. Dabei sind zwei Zeitskalen von Bedeutung [112]: Eine mikroskopische Zeit  $t_{mic}$ , die das System benötigt, um die mikroskopischen Eigenschaften der Wechselwirkung zu verlieren, d.h. die Zeit, nach der sein Verhalten möglicherweise universell ist. Typisch sind hier 10-100 Evolutionsschritte. Die zweite, makroskopische Skala, ist die Zeitskala des universellen Verhaltens im Gleichgewicht,  $t_{mak} \propto L^z$ . **Universelle kritische Dynamik** wird daher auf Zeitskalen  $> t_{mic}$  und im Kurzzeit-Regime der makroskopischen Zeit beobachtet. Typische Zeiten sind hier 50 – 10000 Evolutionsschritte. Zu Beginn der Kurzzeit-Dynamik beobachtet man bei nicht verschwindender Anfangsmagnetisierung **critical initial increase** des Ordnungsparameter, der mit dem Exponent  $\theta$  verbunden ist. Dieser Effekt wurde in dieser Arbeit nicht untersucht.

*Zhengs* Arbeiten [113, 114, 115, 116, 112, 117] beruhen allesamt auf der Annahme, daß sich die Magnetisierung schreiben läßt als

$$\langle M^k \rangle(t, (T - T_c), L, m_0) = b^{-k\beta/\nu} \langle M^k \rangle(b^{-z}t, b^{1/\nu}(T - T_c), b^{-1}L, b^{x_0}m_0) \quad , \quad (2.98)$$

---

<sup>7</sup>Diese Darstellung hat jedoch einen erheblichen Nachteil: Die Korrelationslänge ist zunächst nur über die Korrelationsfunktion erklärt. Diese wiederum beruht auf Erwartungswerten, die nun jedoch nicht mehr auf Grundlage der Gleichgewichts-Wahrscheinlichkeitsdichteverteilung im Phasenraum gebildet werden dürfen, sondern mit neuen insbesondere zeitabhängigen Wahrscheinlichkeitsverteilungen, die wieder spiegeln, wie sich das System aus dem Ungleichgewicht heraus entwickelt. Man muß die zeitabhängige Wahrscheinlichkeitsverteilung jedoch wie eine Gleichgewichts-Wahrscheinlichkeitsdichteverteilung im Phasenraum auffassen, und in diesem Bild ist schwer einzusehen, warum diese nun zu veränderten, insbesondere geringeren Korrelationen führen sollte. Ist die beobachtete zeitabhängige Wahrscheinlichkeitsdichteverteilung im Phasenraum tatsächlich dergestalt, daß starke Korrelationen unwahrscheinlicher sind? Oder führt diese naive Definition der Korrelationslänge doch zu deren Divergenz? Arbeiten zu dieser spannenden Frage sind nicht bekannt.

wobei  $m_0$  die Magnetisierung bei  $t = 0$  bezeichnet. Dieser Ansatz läßt sich jedoch noch verallgemeinern, indem man annimmt, daß der singuläre Teil der Freien Energiedichte wie folgt skaliert:

$$f((T - T_c), h, t) = b^{-d} f((T - T_c) b^{y_t}, h b^{y_h}, t/b^z) \quad . \quad (2.99)$$

Diese Annahme ist konsistent mit denen von *Zheng*, enthält aber nicht mehr die initiale Magnetisierung und kann daher auch nicht den initial *increase* erklären. Dieser Ansatz wird auch in Abschnitt 3.2 und 3.3 verwendet. Mit  $y_t = 1/\nu$  [39] und  $y_h = d - \beta/\nu = (d + \gamma/\nu)/2$  (wobei das *Josephson-law* bereits impliziert wird) ergibt sich durch Ableiten nach dem äußeren Feld die spontane Magnetisierung

$$\langle M \rangle = \left. \frac{\partial f}{\partial h} \right|_{h=0} = b^{-d+y_h} f_h((T - T_c) b^{y_t}, 0, t/b^z) \quad (2.100)$$

mit  $f_h$  der Ableitung von  $f$  nach dem äußeren Feld. Mit der Wahl  $b^{1/z} = t$  ergibt sich dann

$$\langle M \rangle = t^{-\beta/(z\nu)} f_h((T - T_c) t^{1/(z\nu)}, 0, 1) \quad , \quad (2.101)$$

was bei  $T = T_c$  übergeht in

$$M \propto t^{-\beta/(z\nu)} \quad . \quad (2.102)$$

Auf die gleiche Weise findet man eine Reihe weiterer Relationen bei  $T = T_c$ , so zum Beispiel

$$\chi_t = \left. \frac{\partial^2 f}{\partial h^2} \right|_{h=0} \propto t^{\gamma/(z\nu)} \quad (2.103)$$

$$U_t = 1 - \frac{\langle M^2 \rangle}{\langle M \rangle^2} \propto t^{d/z} \quad (2.104)$$

$$V_{1t} = \left. \frac{\partial \log(M)}{\partial T} \right|_{h=0} = \frac{1}{T^2} \left( \frac{\langle M E \rangle}{\langle M \rangle} - \langle M \rangle \right) \propto t^{1/(z\nu)} \quad . \quad (2.105)$$

Diese Gleichungen lassen sich allesamt aus (2.76) - (2.80) mit der Ersetzung  $L \rightarrow t^{1/z}$  entwickeln.

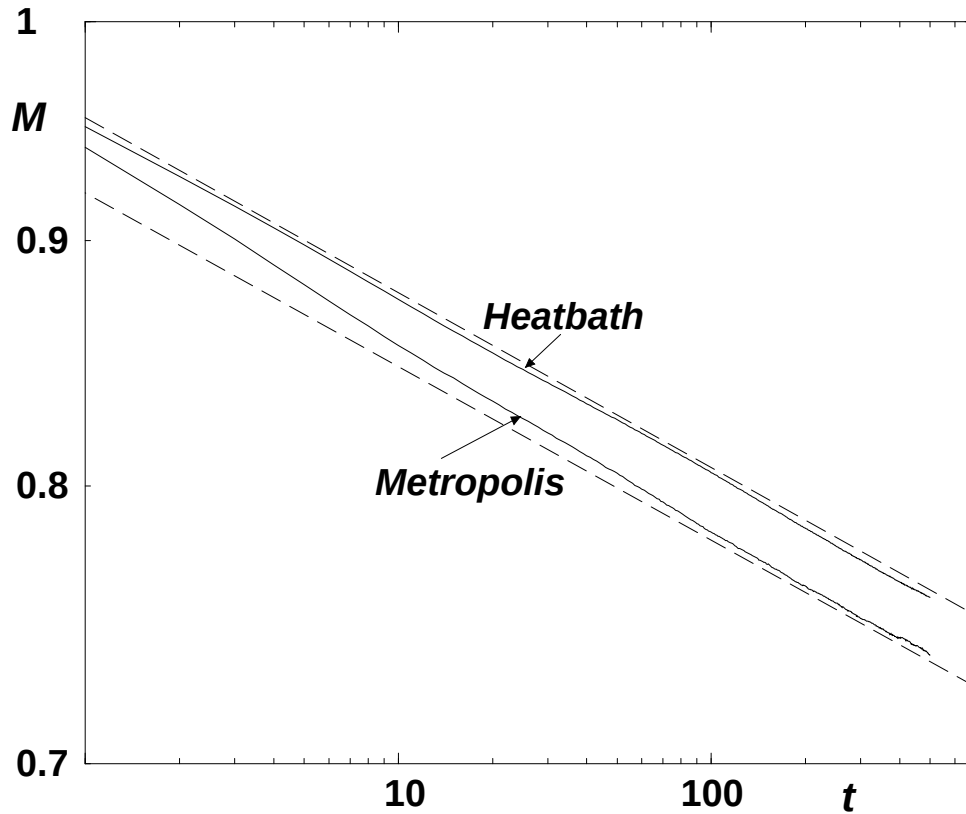
Durch die Analyse dieser vier Größen erhält man drei unabhängige Exponenten-Brüche:  $\gamma/(z\nu)$ ,  $\beta/(z\nu)$  und  $1/(z\nu)$ . Der Bruch  $d/z$  ist mit  $U \propto \chi/\langle M^2 \rangle \propto t^{(\gamma+2\beta)/(z\nu)}$  auf Grund des *Josephson-law* bereits enthalten und bietet keine neue Information.

Um den Fehler in der Analyse zu verringern, bietet es sich an,  $\chi$  gegen  $V_1$  aufzutragen, wobei

$$\chi_t \propto V_{1t}^\gamma \quad . \quad (2.106)$$

In einer doppelt-logarithmischen Darstellung  $\chi_t$  gegen  $V_{1t}$  findet man dann  $\gamma$  als Steigung. Entsprechend verfährt man mit  $\langle M \rangle$  und erhält  $\beta$ . Eine direkte Analyse von  $V_1$  ergibt leider nur  $1/z\nu$ , und der eigentlich interessante statische Exponent  $\nu$  ist nur als Produkt mit  $z$  zu beobachten. Der dynamische Exponent  $z$  ist von geringerem Interesse, weil er wenig Physik enthält und charakteristisch für den Algorithmus ist.

Kritische Dynamik hat gegenüber FSS den entscheidenden Vorteil, ein räumliches Skalieren des Systems nicht notwendig zu machen. Darüberhinaus wird aus „einer Not eine Tugend“, denn critical *slowing* down ist nun nicht mehr unerwünscht, sondern notwendig zur Beobachtung kritischer Exponenten [112]. Daher werden ausschließlich lokale Algorithmen wie *Metropolis* oder *Heatbath* eingesetzt [112, 115]. Es ist eine Erfahrungstatsache, daß



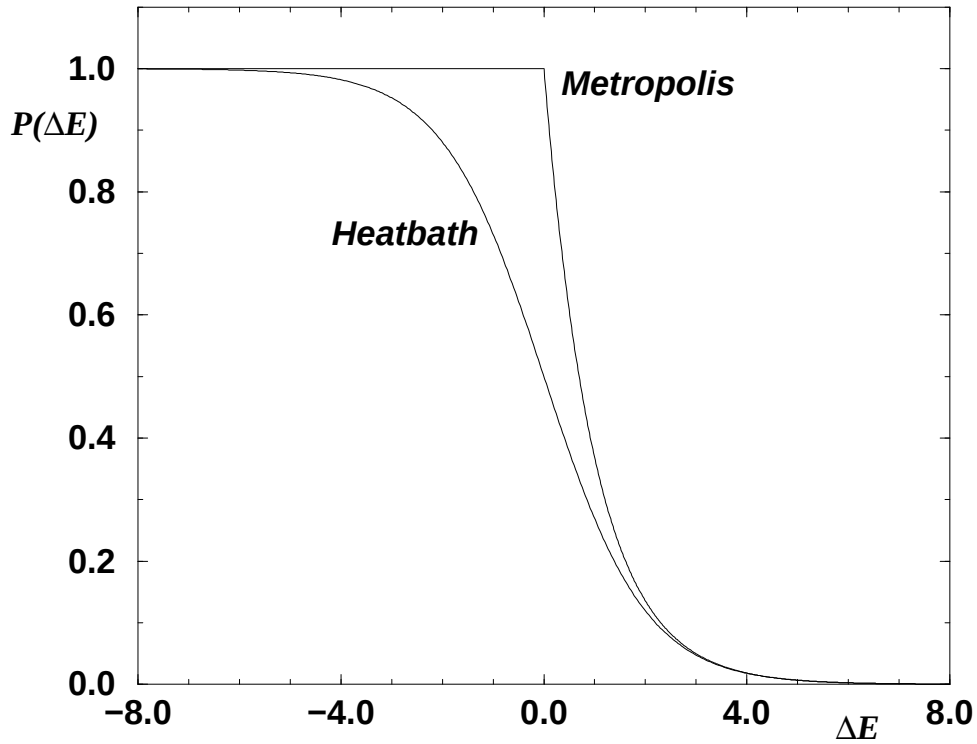
**Abbildung 2.3:** Die doppeltlogarithmische Darstellung von  $\langle M \rangle_t$  in Abhängigkeit von der Zahl der MC-Evolutionsschritte. Der Heatbath-Algorithmus gelangt schneller in das gesuchte lineare Verhalten (angedeutet durch die gestrichelte Linie), als der *Metropolis*-Algorithmus. Die Daten stammen von einer Simulation des *Ising*-Modells auf einem Sierpiński-Teppich  $SC(5, 0)$ , bei  $T = 1.508$ .

$t_{mic}$  für den Heatbath-Algorithmus kleiner ist als für den *Metropolis*-Algorithmus, jedoch  $t_{makro}$  ähnlich ist (s. Abb. 2.3). Daher ist es üblich, für die Untersuchung dynamischer kritischer Phänomene den Heatbath-Algorithmus zu verwenden. Zumindest im *Ising*-Modell kann man diesen Vorteil mit ein wenig *handwaving* verstehen: Im *Metropolis*-Algorithmus entspricht die Flip-Wahrscheinlichkeit für einen Spin nicht der *Boltzmann*-Verteilung, da geflip werden *muß*, wenn dadurch die Energie abgesenkt werden kann. Diese wird nur im Verhältnis zwischen den beiden Flip-Richtungen richtig reproduziert. Der Heatbath-Algorithmus erzeugt jedoch auch lokal die *Boltzmann*-Verteilung. Die unterschiedlichen Übergangswahrscheinlichkeiten sind in Abb. 2.4 dargestellt.

Es gibt im *dynamic scaling* grundsätzlich zwei Herangehensweisen, die jedoch beide von (2.99) abgedeckt werden.

- Starte mit einer geordneten Konfiguration, also von  $T = 0$  und  $\langle m \rangle = 1$  und beobachte deren allmählichen Zerfall, also  $\langle m \rangle \rightarrow 0$ .
- Starte mit einer ungeordneten, zufälligen Konfiguration, also  $T = \infty$  und  $\langle m \rangle \approx 0$  und beobachte, wie  $\langle m^2 \rangle$  allmählich wächst.

Um eine definierte Anfangskonfiguration zu erzeugen, wird der zweite Ansatz häufig modifiziert und die zunächst zufällige Konfiguration durch Änderung zufällig ausgewählter Spins



**Abbildung 2.4:** Im *Ising*-Modell kann der Heatbath-Algorithmus als *Metropolis*-Algorithmus mit modifizierten Flip-Wahrscheinlichkeiten verstanden werden. Ein Vergleich der Wahrscheinlichkeitsverteilungen  $P(\Delta E)$  in Abhängigkeit von der Energiedifferenz zwischen geflippten und ungeflippten Zustand zeigt dann für den Heatbath-Algorithmus eine *Boltzmann*-Verteilung ( $e^{-\Delta E} / (1 + e^{-\Delta E})$ ), für den *Metropolis*-Algorithmus eine nicht-analytische Verteilung ( $e^{-\Delta E}$  für  $\Delta E > 0$ , 1 sonst).

auf  $\langle m \rangle = 0$  gebracht. Im Falle kontinuierlicher Modelle ist auf diese Weise jedoch  $\langle m \rangle = 0$  nicht in endlicher Zeit realisierbar. Es wurde daher eine heuristische Methode entwickelt, die sehr brauchbare Ergebnisse liefert. Der Vollständigkeit halber soll der Algorithmus für XY-Spins hier in Pseudocode dargestellt werden:

```
/* Erzeuge zuf"allige XY-Konfiguration */
for (i=1 ... N)
{
    alpha=random_number(0.0 ... 2*PI);
    site[i].x=cos(alpha);
    site[i].y=sin(alpha);
}

/* Summiere die Magnetisierung auf */
for (i=1 ... N)
{
    magn_x=magn_x+site[i].x;
    magn_y=magn_y+site[i].y;
}

/* Korrigiere nun die einzelnen Spins */
for (i=N ... 1)
{
    pos=random_number(0 .. N);

    /*
     * Es folgt die - nicht normierte - neue Orientierung des Spins:
     * Die alte Orientierung mit einem "Quentchen" der zu kompensierenden
     * Orientierung. Wenn alles glatt gehen w"urde, h"atte jeder Spin etwa
     * die gleiche Korrektur zu tragen.
     */
    new_x=site[pos].x-magn_x/i;
    new_y=site[pos].y-magn_y/i;

    /* Normieren */
    new_x=new_x/sqrt(new_x*new_x + new_y*new_y);
    new_y=new_y/sqrt(new_x*new_x + new_y*new_y);

    /*
     * Die noch zu kompensierende Magnetisierung senkt sich nun um den
     * bereits kompensierten Wert ab
     */
    magn_x=magn_x+new_x-site[pos].x;
    magn_y=magn_y+new_y-site[pos].y;

    /* Den neuen Wert zuweisen */
    site[pos].x=new_x;
    site[pos].y=new_y;
}
```



# Kapitel 3

## Resultate

Aufbauend auf den bisher dargestellten Grundlagen zur numerischen Untersuchung kritischer Phänomene sollen in diesem Kapitel die Ergebnisse dieser Arbeit dargestellt werden. Sie lassen sich in folgende Abschnitte einteilen: Zunächst wird eine neue Methode dargestellt, kritische Exponenten aus Monte-Carlo-Simulationen zu erhalten [118]. Neben dem bereits in 2.5 skizzierten Verfahren der kritischen Dynamik wird diese Methode dazu eingesetzt, in Abschnitt 3.2 kritische Exponenten von *Ising*-Modellen auf Fraktalen durch Simulation zu erhalten [101]. Die Ergebnisse bestätigen die These, daß eine nicht-ganzzahlige *Hausdorff*-Dimension auch im Sinne kritischer Phänomene nicht-ganzzahlig ist. Ähnliche Gitter wurden dann dazu verwendet, das Stiefel-Modell  $V_{2,2}$  in nicht-ganzzahligen Raumdimensionen zu untersuchen. Die Ergebnisse hierzu sind im letzten Kapitel 3.3 angegeben.

### 3.1 $\chi/\chi'$ -Methode

Zu Beginn der Arbeit bestand bereits der Verdacht, daß bei der Untersuchung von Phasenübergänge auf Fraktalen das FSS Schwierigkeiten haben könnte, da sie auf der Annahme einer stetigen und glatten, jedenfalls systematischen Abhängigkeit kritischen Verhaltens von der Systemgröße basiert. Wenn das betrachtete Systeme nicht translationsinvariant ist, drängt sich der Verdacht auf, daß kritisches Verhalten nicht mehr auf dieselbe Weise mit der Systemgröße skaliert. Beispiele für Systeme, bei denen mit Schwierigkeiten bei der Verwendung von FSS zu rechnen ist, sind neben den Fraktalen auch quasiperiodische Parkettierungen [119, 120] oder Ecken und Kanten [121, 122, 123]. Um diesen Problemen zu entgehen, wurde eine Methode entwickelt, die es ermöglicht, mit sehr geringen CPU-Aufwand recht genaue Schätzer für kritische Exponenten außerhalb des FSS zu erhalten. Im Prinzip ist diese Methode allgemein auf alle thermodynamischen Größen anwendbar, die kritisches Verhalten zeigen und nicht wie der Name der Methode suggeriert, auf  $\chi$  beschränkt. Es wird sich jedoch im folgenden zeigen, daß  $\chi$  für die Anwendung prädestiniert ist. Die Darstellung hält sich im wesentlichen an die in der Veröffentlichung [118] (akzeptiert bei *Physica A* am 29.02.2000) gewählte.

#### 3.1.1 Einführung zur Methode

Eine in der Nähe von  $T_c$  allmählich divergierende thermodynamische Größe läßt sich **außerhalb des FSS** unter Einbeziehung der *corrections to scaling* durch

$$\chi^\pm = |T - T_c|^{-\gamma} (a_0^\pm + a_1^\pm (T - T_c)^{\omega_1} + a_2^\pm (T - T_c)^{\omega_2} + \dots) \quad (3.1)$$

annähern, wobei hier mit  $\chi$  die Suszeptibilität als Beispiel gewählt wurde. Die  $a_i^+$  beziehen sich auf HTP, die  $a_i^-$  auf LTP und es ist im allgemeinen  $a_i^- \neq a_i^+$  (s. Abschnitt 1.6.2). Mit dieser Näherung sind für einen Fit der Ergebnisse einer MC-Simulation mindestens vier freie Parameter notwendig, nämlich  $T_c$ ,  $\gamma$ ,  $a_0^+$  und  $a_0^-$ . Im allgemeinen ist  $a_0$  nur von sekundärem Interesse. Man kann es eliminieren, indem man statt (3.1)  $\chi/\chi'$  betrachtet. Die Ableitung  $\chi'$  meint dabei  $\chi' = \frac{\partial}{\partial T}\chi$  und wird wie unten gezeigt durch höhere Momente dargestellt. Für die verallgemeinerte Darstellung von  $\chi$  mit

$$\chi^\pm = |T - T_c|^{-\gamma} f^\pm(T - T_c) \quad (3.2)$$

findet man dann für  $\chi^\pm/\chi^{\pm'}$

$$\frac{\chi^\pm}{\chi^{\pm'}} = \frac{T - T_c}{-\gamma + (T - T_c) \frac{f^{\pm'}}{f^\pm}} \quad (3.3)$$

Mit dem in (3.1) verwendeten  $f^\pm$

$$f^\pm(T - T_c) = \sum_{i=0} a_i^\pm |T - T_c|^{\omega_i} \quad (3.4)$$

mit  $\omega_0^+ = \omega_0^- = 0$  ergibt sich dann sofort

$$(T - T_c) \frac{f^{\pm'}}{f^\pm} = \frac{\sum_i \omega_i \frac{a_i^\pm}{a_0^\pm} |T - T_c|^{\omega_i}}{\sum_i \frac{a_i^\pm}{a_0^\pm} |T - T_c|^{\omega_i}} \quad (3.5)$$

Da  $\omega_i \geq 0$  verschwindet dieser Term für  $T \rightarrow T_c$  und (3.3) wird asymptotisch linear. In der Umgebung von  $T_c$  läßt sich (3.3) darstellen als

$$\frac{\chi^\pm}{\chi^{\pm'}} = \frac{T - T_c}{-\gamma} \left( 1 + \sum_{i=1} b_i |T - T_c|^{\kappa_i} \right) \quad (3.6)$$

Für 2D-*Ising* ist die Vereinfachung  $\omega_i = i$  sinnvoll und daher auch  $\kappa_i = i$ , also mit analytischen Korrekturen. Für  $b_1$  ergibt sich dann beispielsweise

$$b_1 = \frac{a_1}{a_0} \quad (3.7)$$

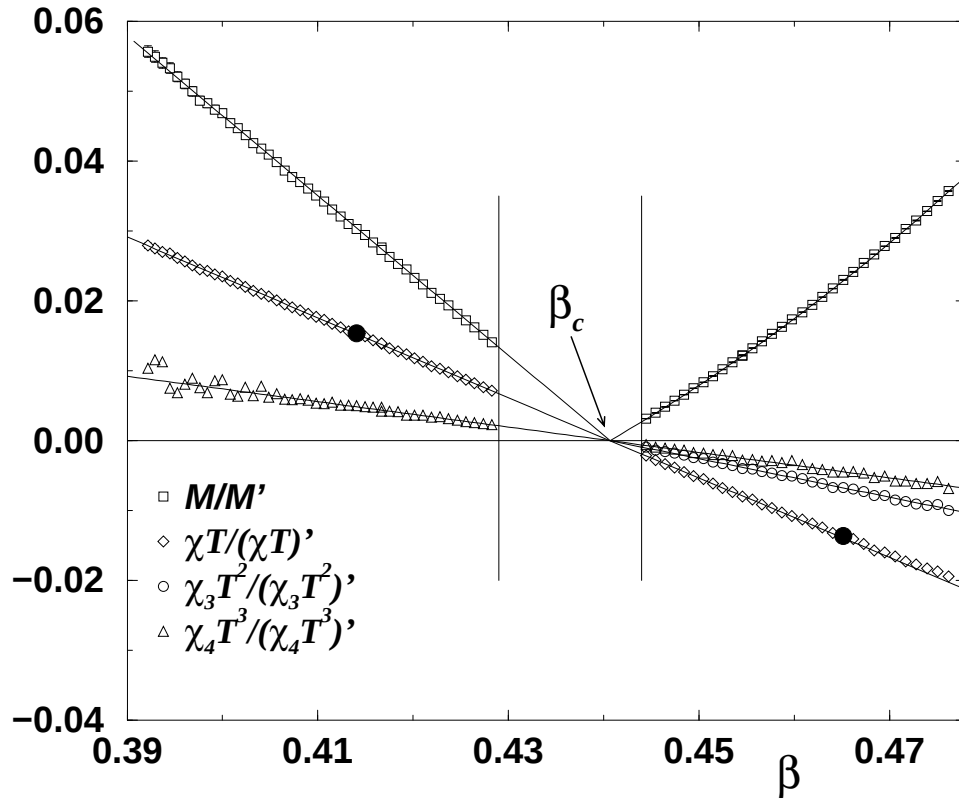
Unabhängig von der Wahl der  $\omega_i$  gibt es in Gleichung (3.6) nun keine lineare Amplitude mehr, die Zahl der notwendigen freien Parameter ist zwei, nämlich  $T_c$  und  $\gamma$ . Der Preis, den man für diese Vereinfachung und damit zunächst kleineren Fehler im Fit zahlt, ist die größere Unsicherheit von  $\chi/\chi'$ , da der Term  $\chi'$  komplizierter ist und höhere Momente enthält. Hier bewahrheitet sich die Faustregel, daß man einer thermodynamischen Größe durch irgendwelche Transformationsoperationen nicht mehr Information abgewinnen kann, als man auch ohne die Transformation erhält. Es zeigt sich jedoch, daß (3.6) neben der geringeren Zahl notwendiger freier Parameter im Fit noch eine wichtige zusätzliche Eigenschaft hat.

Zunächst fällt auf, daß (3.6) in der extrem vereinfachten Darstellung

$$\frac{\chi^\pm}{\chi^{\pm'}} = \frac{T - T_c}{-\gamma} \quad (3.8)$$

keine Unterscheidung zwischen HTP und LTP mehr erfordert. Das bedeutet in der Konsequenz, **daß prinzipiell bereits zwei Datenpunkte ausreichen, um den kritischen Exponenten zu bestimmen**. Selbstverständlich kann ein solches Ergebnis lediglich als Richtwert dienen, denn bereits die Fehlerabschätzung wird mehr als vage.

Bereits in der Einführung wurde betont, daß der Fit von  $\chi$  bzw.  $\chi/\chi'$  gegen (3.1) bzw. (3.6) außerhalb des FSS stattfinden muß. Um die höheren Korrekturterme, das *correction to scaling*, so klein wie möglich zu halten, ist es notwendig, so nah wie möglich an  $T_c$  zu simulieren. Die Simulation außerhalb des FSS durchzuführen, bedeutet jedoch  $\xi \ll L$ . Es wurde bereits in 2.2.1 darauf hingewiesen, daß die CPU-Zeit typischerweise mit  $L^d$  anwächst und für  $T \rightarrow T_c$  divergiert  $L$  wegen  $\xi \ll L$  und damit auch die Simulationszeit. Jede Simulation, die sich nicht FSS zunutze macht, wird daher auf Datenpunkte in der unmittelbaren Umgebung der kritischen Temperatur verzichten müssen. Um die kritische Temperatur herum wird es also einen mehr oder weniger breiten Streifen ohne Datenpunkte geben. Dieser Streifen ist in Abb. 3.1 um  $T_c$  herum zu sehen. Er trennt die Ergebnisse in



**Abbildung 3.1:**  $(\chi T)/(\chi T)'$  und andere Funktionen dieser Form aufgetragen gegen die inverse Temperatur  $\beta = 1/T$ .  $\langle M \rangle / \langle M' \rangle$  ist in LTP mit einem Faktor 10 skaliert. Seine Steigung ergibt  $1/\beta$  in LTP und  $2/\gamma$  in HTP. Die Steigung von  $(\chi T)/(\chi T)'$  ergibt  $\gamma^{-1}$ ,  $(\chi_3 T^2)/(\chi_3 T^2)'$  ergibt  $\gamma_3^{-1}$  und  $(\chi_4 T^3)/(\chi_4 T^3)'$  ergibt  $\gamma_4^{-1}$ . Alle Graphen schneiden sich bei  $\beta_c = 0.440686 \dots$ . Es sind keine Fehlerbalken für  $\langle M \rangle / \langle M' \rangle$  und  $(\chi T)/(\chi T)'$  eingetragen, da sie keiner als die Symbole sind. Die eingezeichneten durchgezogene Linie ist im Falle  $\langle M \rangle / \langle M' \rangle$  exakt, ansonsten Näherungen. Die senkrechten Striche markieren die Lücke, innerhalb derer keine Ergebnisse bekannt sind.

HTP und LTP. Um alle Daten in einem gemeinsamen Fit auswerten zu können und damit den Fehler von  $T_c$  und  $\gamma$  zu minimieren, verwendet man zur Darstellung der Parameter  $a^\pm$

und  $b^\pm$  Theta-Funktionen:

$$a^\pm = a^+ \theta(T - T_c) + a^- (1 - \theta(T - T_c)) \quad . \quad (3.9)$$

An dieser Stelle kommt die eigentliche Besonderheit der vorgeschlagenen Modifikation (3.3) zum Tragen: Wenn unter Verwendung der  $\theta$ -Funktion die Funktion (3.6) auf alle verfügbaren Daten in HTP und LTP *gleichzeitig* angewandt werden kann, dann wird der Fit insbesondere im linearen Term  $1/\gamma$ , der in HTP und LTP gleich ist, wesentlich empfindlicher. Insbesondere steigt die Empfindlichkeit für weiter von  $T_c$  entfernt liegende Punkte. Dieses Verhalten steht im Gegensatz zu einem Fit von  $\chi$  gegen (3.1), der **direkten Methode**, wo der wesentliche Beitrag zum Schätzer für  $\gamma$  aus den Punkten nahe bei  $T_c$  stammt. In der Folge bedeutet dies, daß die Verwendung eines Fits von  $\chi/\chi'$  gegen (3.6) bei kurzer Rechenzeit deutlich bessere Ergebnisse liefert als die direkte Methode.

### 3.1.2 Anwendung auf 2D-Ising

Zur Untersuchung der oben angegebenen Methode wurde das zweidimensionale *Ising*-Modell herangezogen. Bei der Simulation wurde sowohl durch Messung der Korrelationslänge über die Fourierkomponenten der Korrelationsfunktion [124] (s. Abschnitt 3.2.3), als auch auf Grund der bekannten Gleichungen für die Korrelationslänge im 2D-*Ising* [3] (s. Abschnitt 1.6.1), mit  $\xi \leq L/10$  sichergestellt, daß  $L \geq 10\xi$ . Die Systemgröße  $L$  lag in einem Bereich zwischen 100 und 350 bei einer Temperatur zwischen  $T = 2.10$  und  $T = 2.55$ , wobei  $T_c = 2/\ln(\sqrt{2} + 1) \approx 2.27$ . Es wurden wie üblich periodische Randbedingungen angewandt. In LTP wurde der *Wolff*-Algorithmus verwendet, in HTP der Algorithmus von *Swendsen* und *Wang* (s. 2.2.2). Die Zahl der *Updates* betrug 500.000, um das System ins Gleichgewicht zu bringen, und  $3 \cdot 10^6$  für die Statistik. Für jede Temperatur wurden folgende Größen berechnet:

$$E = -J \sum_{\langle i,j \rangle} s_i s_j \quad (3.10)$$

$$\chi_1 = \langle m \rangle = \frac{\langle M \rangle}{N} \quad (3.11)$$

$$\chi_2 = \chi = \frac{\langle M^2 \rangle - \langle M \rangle^2}{N k_B T} \quad (3.12)$$

$$\chi_3 = \frac{\langle M^3 \rangle - 3\langle M \rangle \langle M^2 \rangle + 2\langle M \rangle^3}{N k_B^2 T^2} \quad (3.13)$$

$$\chi_4 = \frac{\langle M^4 \rangle - 4\langle M \rangle \langle M^3 \rangle + 12\langle M^2 \rangle \langle M \rangle^2 - 3\langle M^2 \rangle^2 - 6\langle M \rangle^4}{N k_B^3 T^3} \quad , \quad (3.14)$$

wobei für die Energie die Summe über alle nächsten Nachbarn führt, also über  $N = L^2$  Spins. Die Mittelwerte werden durch  $\langle \dots \rangle$  bezeichnet. Die  $\chi_n$  sind die  $n$ ten Ableitungen der Freien Energiedichte nach dem Feld. Zusätzlich wurden die für (3.6) benötigten Ableitungen der  $\chi_n$  nach  $T$  berechnet und zwar unter Verwendung höherer Momente:

$$\frac{\partial}{\partial \beta} \langle A \rangle = \langle A \rangle \langle E \rangle - \langle AE \rangle \quad (3.15)$$

Da sich wie erwartet ein kleinerer Fehler für die Untersuchung von  $\chi_n T^{n-1}$  statt  $\chi_n$  und entsprechend  $\chi_n T^{n-1}/(\chi_n T^{n-1})'$  statt  $\chi_n/\chi'_n$  einstellte, sind im folgenden die Ergebnisse für diese Größen dargestellt. Aus demselben Grund wurden alle Ableitungen und alle Fits in Abhängigkeit von  $\beta = 1/T$  anstatt von  $T$  durchgeführt.

Die Gleichungen (3.11-3.14) sind bei endlichen Systemgrößen nur in LTP gültig. In HTP müßten die ungeraden Momente von  $\langle M \rangle$  verschwinden, sie sind jedoch in der Größenordnung ihrer Standardabweichung,  $\sqrt{\sigma^2(\langle M \rangle)} \propto \chi^{1/2}$  (s. Abschnitt 2.2.1), weil sie als Momente von  $\langle |M| \rangle$  ermittelt werden [125]. Sie werden daher Null gesetzt.

In Abb. 3.1 sind die Quotienten  $f/f'$  der in (3.11-3.14) angegebenen Größen als Funktion der inversen Temperatur dargestellt. Wie mit (3.6) zu erwarten, schneiden sich alle Graphen in 0 bei  $\beta_c = 1/T_c$ . Wie bereits oben angedeutet, wurden in (3.1) und (3.6) für die Behandlung des 2D-*Ising* die  $\omega_i = i$  und  $\kappa_i = i$  gesetzt. Die Daten wurden also gegen die Funktionen

$$\langle f \rangle = |\beta - \beta_c|^{-\mu(f)} (a_0^\pm + a_1^\pm(\beta - \beta_c) + a_2^\pm(\beta - \beta_c)^2 + \dots) \quad (3.16)$$

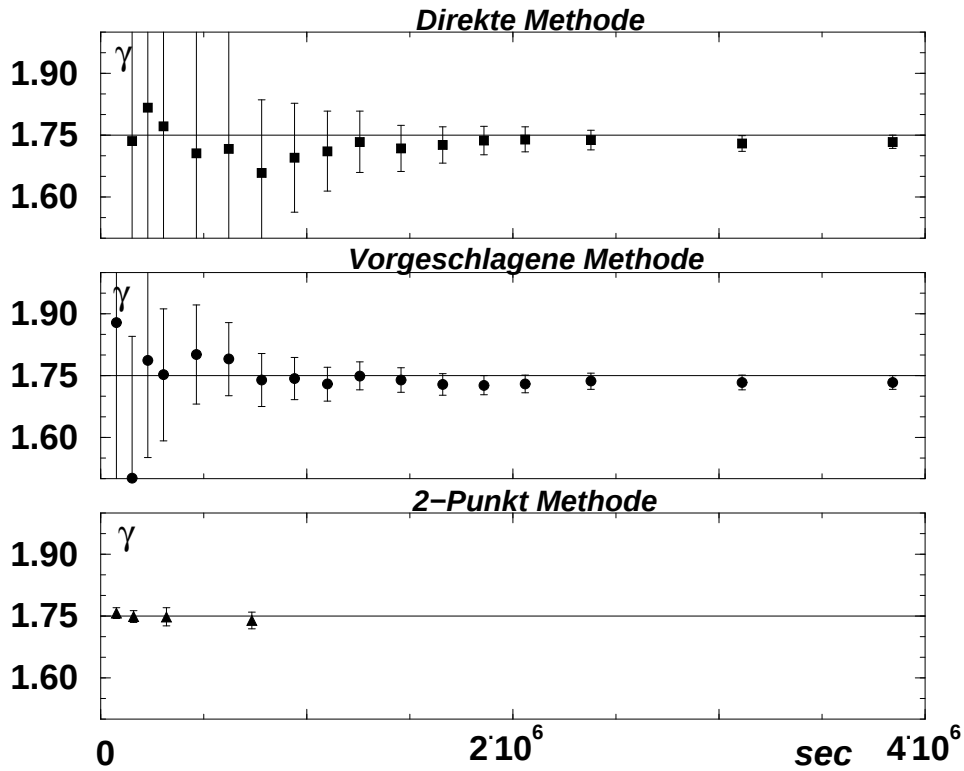
$$\langle f \rangle / \langle f' \rangle = \frac{(\beta - \beta_c)}{-\mu(f)} (1 + b_1^\pm(\beta - \beta_c) + b_2^\pm(\beta - \beta_c)^2 + \dots) \quad (3.17)$$

gefittet, wobei für  $a_i^\pm$  und  $b_i^\pm$  Gleichung (3.9) verwendet wurde. Die zu erwartenden Ergebnisse sind für 2D-*Ising* exakt bekannt:  $\mu(f)$  für  $f = \langle m \rangle$  ist  $-\beta = -1/8$ , für  $f = \chi$  ist es  $\gamma = 14/8 = 7/4$ , für  $f = \chi_3$  ist es  $\gamma_3 = 29/8$ , für  $f = \chi_4$  ist es  $\gamma_4 = 44/8 = 11/2$ . Der Zusammenhang der Exponenten  $\gamma_3$  und  $\gamma_4$  mit den üblichen findet sich sofort mit (1.34):  $\gamma_3 = \gamma + \nu d - \beta$  und  $\gamma_4 = \gamma + 2(\nu d - \beta)$

Zur eingehenderen Untersuchung des Anwendungsbereiches der Methode, wurde der Datensatz in der folgenden Analyse auf die Daten zwischen  $T = 2.150$  und  $T = 2.230$  sowie  $T = 2.335$  und  $T = 2.415$  beschränkt, also je 17 Datenpunkte in LTP und HTP. Diese Einschränkung verschlechtert natürlich das Ergebnis, ermöglicht aber eine systematische Untersuchung der Vor- und Nachteile der vorgeschlagenen Methode, zumal kein direktes Interesse an den exakt bekannten Exponenten des zweidimensionalen *Ising*-Modells besteht. Für beide Methoden (3.6) und (3.1) wurde ein Korrekturterm angesetzt, was zu vier freien Parametern ( $T_c$ ,  $\gamma$ ,  $b_1^+$  und  $b_1^-$ ) für (3.6) und zu sechs freien Parametern ( $T_c$ ,  $\gamma$ ,  $a_0^+$ ,  $a_0^-$ ,  $a_1^+$  und  $a_1^-$ ) für (3.1) führt. Es ist naheliegend, bei ausreichender Menge an Datenpunkten die Zahl der freien Parameter bei der Untersuchung unbekannter Systeme zu vergrößern, insbesondere aber die *corrections to scaling*  $\omega_i$  bzw.  $\kappa_i$  offen zu lassen.

Verwendet man alle zur Verfügung stehenden Daten im oben beschriebenen Intervall, findet man  $\gamma_{\chi T}^{\text{dir}} = 1.733(16)$  bei der Verwendung der direkten Methode (3.1) und  $\gamma_{\chi T/(\chi T)'}^{\text{mod.}} = 1.733(17)$  bei der Verwendung der vorgeschlagenen Modifikation (3.6). Um einen Vergleich der Methoden zu ermöglichen, wenn weniger CPU-Zeit zur Verfügung steht, wurde  $\gamma$  für verschiedene, kleinere Datensätze unter Verwendung der beiden Methoden geschätzt. Die kleineren Datensätze wurde erzeugt, indem aus der Mitte heraus jeweils ein Paar von Datenpunkten, einer in LTP und einer in HTP, entfernt wurde. In Abb. 3.2 sind die Ergebnisse für diese Simulation als Funktion der CPU-Zeit dargestellt, die man benötigen würde, um die verbleibenden Datenpunkte zu simulieren. In dieser Darstellung wird die These bestätigt, daß die vorgeschlagene Methode (3.6) stark von der Lücke profitiert: Während der Schätzer des Fehlers der direkten Methode (3.1) sehr schnell mit sinkender CPU-Zeit wächst, ist deren Einfluß auf die mit Hilfe der Modifikation (3.6) berechneten Ergebnisse gering. Wenn 14 der 34 Datenpunkte entfernt werden, verdoppelt sich der Fehler der Modifikation, während die direkte Methode einen fünfmal so großen Fehler aufweist. Umgekehrt ist zu erkennen, daß sich mit steigender zur Verfügung stehender CPU-Zeit die Ergebnisse der beiden Methode angleichen. Es ist sogar zu erwarten, daß die Qualität der direkten Methode (3.1) für ausreichend große CPU-Zeit die der vorgeschlagenen Modifikation übersteigt.

Die letzte Zeile in Abb. 3.2 zeigt sehr ungefähre Schätzer auf Basis von nur zwei Punkten, wie oben angedeutet. Die zwei Punkte lagen symmetrisch um  $\beta_c$  und wurden in sehr



**Abbildung 3.2:** Ergebnisse für  $\gamma$  als Funktion der Simulationszeit, die auf einen PC der Pentium-Klasse normiert wurde. Der exakte Wert für  $\gamma = 7/4$  ist eingezeichnet.

kurzer Zeit berechnet, bis etwa einem Fünzigstel der CPU-Zeit für alle 34 Punkte. Der Schätzer für  $\gamma$  auf Basis der beiden Punkte, die am Rande des Intervals liegen (in Abb. 3.1 durch zwei dicke Punkte gekennzeichnet) ist mit  $\gamma_{\chi T/(\chi T)'}^{2 \text{ Pkt.}} = 1.761(13)$  immer noch kompatibel mit dem exakten Ergebnis. Man mag gegen diese „Quick-and-dirty“-Methode einwenden, sie sei sehr empfindlich auf  $b_1^+ \neq b_1^-$  und funktioniere nur deshalb so gut, weil im speziellen Fall des 2D-Ising  $b_1^+ = b_1^-$ . Im letzten Abschnitt 3.1.3 werden jedoch die Ergebnisse für das 3D-Ising diese Zweifel ausräumen.

Bisher beschränkte sich die Analyse auf  $\chi$ . Um die Methode jedoch autonom auf unbekannte Systeme anzuwenden, ist es von großer Bedeutung, auch noch einen zweiten Exponenten zu finden, um die restlichen 4 aus den Skalengesetzen zu gewinnen. Zunächst ist festzustellen, daß der Exponent  $\alpha$  auf Grund der logarithmischen Divergenz der spezifischen Wärme  $c_H$  im 2D-Ising als Kandidat entfällt. Jedoch sind auch ganz allgemein Schwierigkeiten mit diesem Exponenten zu erwarten, da  $c_H$  einen relevanten, regulären Teil besitzt [76] und darüberhinaus die Momente der Energie typischerweise sehr große Varianzen aufweisen.

In der Konsequenz bedeutet dies, daß zunächst nur magnetische Größen in Frage kommen. Da bereits bekannt ist, daß die vorgeschlagene Methode von der Lücke profitiert, fallen solche magnetischen Größen weg, die in HTP nicht existieren, also alle  $\chi_n$  mit ungeradem  $n$ . Die Größe mit den niedrigsten Momenten, die in Frage kommt, ist dann  $\chi_4$ . Jedoch sind ihre Fluktuationen, wie in Abb. 3.1 auch deutlich zu sehen, viel zu groß, als daß sie einen verlässlichen Schätzer für  $\gamma_4$  liefern könnten. Hier ergibt sich  $\gamma_{\chi_4 T^3/(\chi_4 T^3)'}^{\text{mod.}} = 5.51(98)$ , sehr nahe am exakten Ergebnis 5.5, jedoch mit einem viel zu großen Fehler.

Überraschenderweise zeigt sich, daß  $\beta$  mit der vorgeschlagenen Methode sehr gut be-

stimmbar ist, während der direkte Fit (3.1) nicht einmal mehr konvergiert. Auch hier wird deutlich, daß die vorgeschlagene Methode (3.6) sehr gut mit Ergebnissen in relativ großer Entfernung zu  $T_c$  umgehen kann; es ergab sich  $\beta_{M/M'}^{\text{mod.}} = 0.1261(18)$ , sehr nah am exakten Wert von 0.125.

### 3.1.3 Anwendung auf 3D-*Ising*

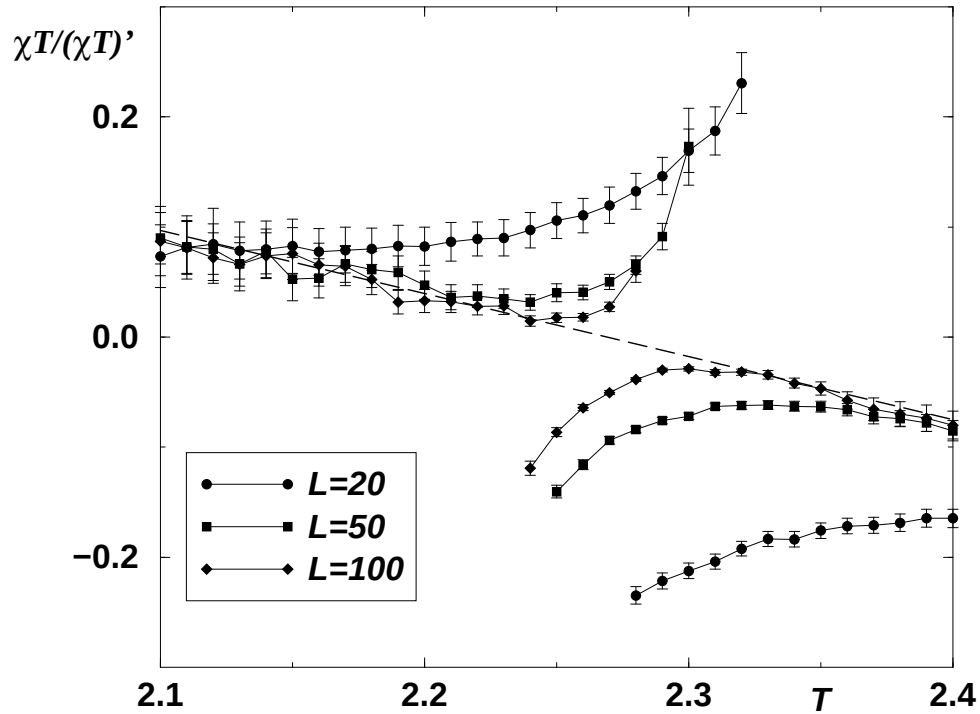
Um die Methode auch auf einen Fall anzuwenden, der in der aktuellen Forschung behandelt wird, wurde das 3D-*Ising* ausgewählt. Auf Grundlage der Arbeit von *Hasenbusch* [34], mit der  $L \gg \xi$  zuverlässig sichergestellt werden konnte, wurde das System an zwei Temperatur-Paaren simuliert. Das erste Paar bei  $1/T_< = 0.2270$  und  $1/T_> = 0.2163$  mit  $L = 64$  in LTP und  $L = 40$  in HTP ergab mit der gleichen Zahl von MC-Evolutionsschritten wie bereits oben für  $1/T_c = 0.2219(4)$  und  $\gamma = 1.284(83)$ . Die kritische Temperatur ist aus Simulationen sehr genau bekannt [77] und beträgt  $1/T_c = 0.2216544(3)$ . Das Ergebnis für  $\gamma$  ist mit solchen aus der Renormierungsgruppe zu vergleichen, wo man  $\gamma = 1.2397(13)$  [126] findet. Für dieses erste Paar wurde eine CPU-Zeit von etwa 16.5 Tagen aufgewendet.

Die Lage des zweiten Paares wurde gezielt sehr weit entfernt von  $T_c$  gewählt;  $L = 20$  bei  $1/T_> = 0.20421$  und  $L = 30$  bei  $1/T_< = 0.2391$ . Das Resultat  $\gamma = 1.348(53)$  und  $1/T_c = 0.2231(74)$  ist in Anbetracht der kurzen Rechenzeit von nur 1.3 Tagen noch recht gut (innerhalb von  $\pm 2$  Standardabweichungen) und unterstreicht die Wichtigkeit des ersten Korrekturterms, der hier nicht berücksichtigt werden kann.

Neben den einfachen und schnellen Schätzern kritischer Exponenten, bietet die vorgestellte Methode zusätzlich einen guten, visuellen Zugang zu der Frage, ob  $\xi \ll L$  gut genug erfüllt ist. In Abb. 3.3 ist exemplarisch das Verhalten von  $\chi/\chi'$  bei der Annäherung an  $T_c$  für verschiedene Systemgrößen dargestellt. Zum einen ist bei verschiedenem Verhalten unterschiedlich großer Systeme sofort klar, daß die Korrelationslänge zu groß geworden ist. Allerdings gilt dieses Kriterium nicht speziell für  $\chi/\chi'$ . Zum anderen bietet diese Größe jedoch ein zusätzliches, brauchbares Kriterium:  $\xi \ll L$  ist nicht mehr ausreichend gut erfüllt, wenn die höheren Ordnungen bei Annäherung an  $T_c$  zu wachsen beginnen.

### Zusammenfassung

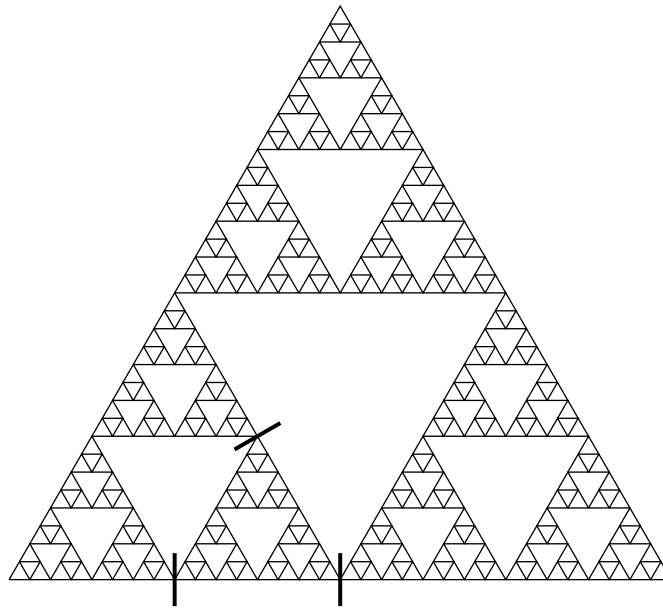
Die  $\chi/\chi'$ -Methode bietet einen effizienten und schnellen Zugang zu kritischen Exponenten, vor allem aber für  $\gamma$ . Es ist nicht zu erwarten, daß die Methode dem FSS überlegen sein könnte. Jedoch ist sie der einzigen Alternative zum FSS, nämlich dem direkten Fit mit (3.1) zumindest in der Effizienz deutlich überlegen. Diese Methode wird im folgenden ergänzend zum *dynamic scaling* verwendet.



**Abbildung 3.3:** Rohdaten einer (schnellen; Gesamtzeit 17h auf i586-200)  $(\chi T)/(\chi T)'$ -Simulation. Sobald FSS einsetzt, wachsen die höheren Ordnungen bei Annäherung an  $T_c$  an. Das exakte Verhalten ist in der ersten Ordnung als gestrichelte Linie eingezeichnet. Deutlich erkennt man, daß in ausreichender Entfernung zur kritischen Temperatur alle Systeme etwa die gleichen Resultate liefern, bis, beginnend mit dem kleinsten System, das FSS zu groß wird.

### 3.2 Das Ising-Modell auf einem Sierpiński-Teppich

Die Ergebnisse in der Renormierungsgruppe beruhen häufig auf einer Entwicklung in der Raumdimension als  $d = 4 - \epsilon$ . Es ist daher nur natürlich, Phasenübergänge auf Gittern mit nicht ganzzahliger Raumdimension zu untersuchen, um die Lücke zwischen den Gittern ganzzahliger Raumdimension zu füllen. Solche **fraktalen Gitter** sind zwar skaleninvariant und daher für die Renormierungsgruppe sehr attraktiv, haben aber den Nachteil, nicht translationsinvariant zu sein [127]. In den achtziger Jahren begann eine systematische Untersuchung fraktaler Gitter [128, 129, 130]. Bei der Untersuchung zeigt sich unmittelbar, daß Gitter, bei denen durch eine konstante Zahl von Schnitten beliebig große Teile herausgetrennt werden können, wobei deren Größe lediglich von der Gesamtgröße des Gitters abhängt, nicht bei endlichen Temperaturen ordnen können. Dieses Fehlen eines Phasenüberganges<sup>1</sup> ist darauf zurückzuführen, daß die angesprochen beliebig großen Gitterabschnitte durch ihre endliche Zahl an Bindungen zum Restsystem praktisch unabhängig vom restlichen Gitter sind. Ein solches Gitter zerfällt damit in eine Zahl unabhängiger Untergitter, die niemals kollektiv ordnen. In Abb. 3.4 ist das Gitter mit angedeuteten Schnitten dargestellt. Gitter, die diese Eigenschaft nicht haben, besitzen eine unendliche



**Abbildung 3.4:** Eine *Sierpiński*-Dichtung (Gasket) besitzt eine endliche *ramification* order. Das bedeutet, daß es einer konstanten Zahl von Schnitten bedarf, um - je nach Systemgröße - beliebig große Stücke aus dem Gitter herauszuschneiden. Die fetten Linien sind exemplarische Schnitte.

*ramification order* [130, 127]. Es ist damit von vornherein klar, daß neben der noch zu diskutierenden Dimension des Gitters noch andere geometrische Faktoren eine Rolle spielen. Eine Größe, die zumindest unter dem Verdacht steht, relevant zu sein, ist die Lakunarität, ein Maß für die Löchrigkeit des Fraktals [131, 132, 133, 134].

<sup>1</sup>Es soll in dieser Argumentation an *Mermin* und *Wagner* erinnert werden. Aber wir haben hier nicht topologische Defekte zu erwarten.

### 3.2.1 Definition der Dimension

Es stellt sich zunächst die Frage nach der richtigen Definition der Raumdimension. Üblicherweise wird hier die **Hausdorff-Dimension**  $\dim_{\mathcal{H}}$  angegeben [135]:

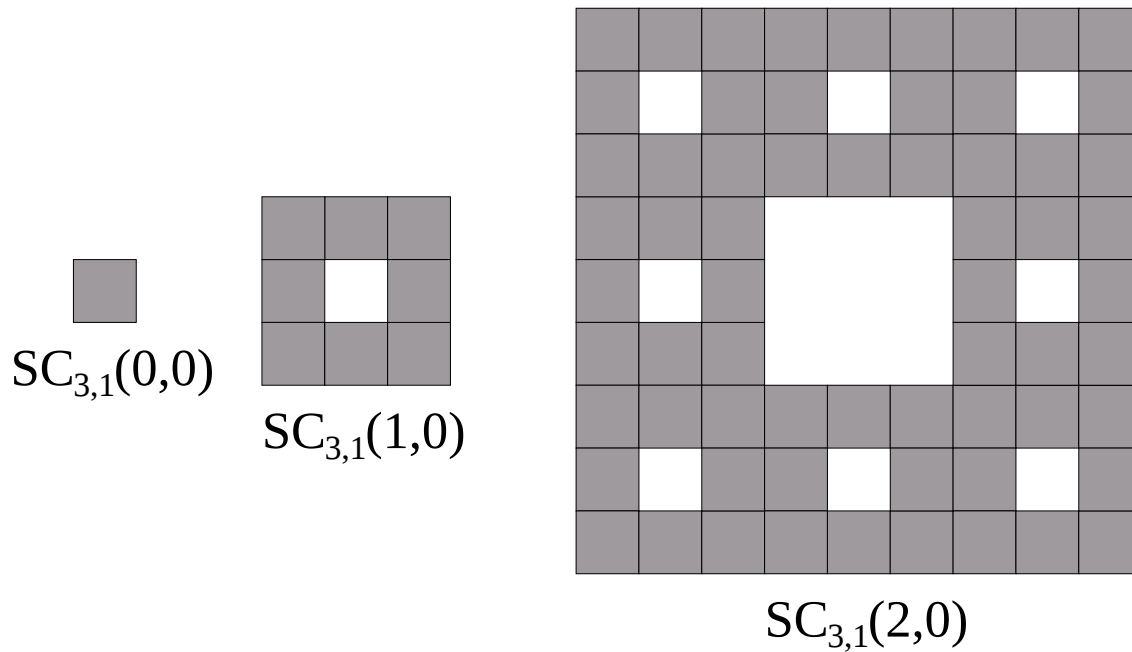
$$\dim_{\mathcal{H}}(B) = \inf \left\{ \alpha : \alpha > 0, \mathcal{H}_S^\alpha(B) = 0 \right\} = \sup \left\{ \alpha : \alpha > 0, \mathcal{H}_S^\alpha(B) = \infty \right\} \quad , \quad (3.18)$$

wobei

$$\mathcal{H}_S^\alpha(B) = \frac{\pi^{\alpha/2}}{\Gamma(1 + \frac{1}{2}\alpha)} \lim_{\delta \rightarrow 0^+} \left\{ \sum_i r_i^\alpha : B \subset \bigcup_i b(x_i, r_i), r_i < \delta \right\} \quad . \quad (3.19)$$

Die zugrundeliegende Idee ist, daß die *Hausdorff*-Dimension gerade diejenige Potenz  $\alpha$  bezeichnet, bei der das **Hausdorff-Maß**  $\mathcal{H}_S^\alpha(B)$  gerade von 0 in die Divergenz übergeht. Das *Hausdorff*-Maß  $\mathcal{H}_S^\alpha(B)$  ist die Summe der Volumina aller  $\alpha$ -dimensionaler Kugeln  $b(x, r)$  mit Radius  $r < \delta$ , die zusammengenommen die Menge  $B$  überdecken für  $\delta \rightarrow 0$ .

Es gibt noch eine ganze Reihe weiterer Definitionen der Dimension [136]. Im Falle des hier untersuchten Gitters, dem *Sierpiński*-Teppich, fallen insbesondere die *Hausdorff*-Dimension und die „Kästchendimension“ zusammen. Der *Sierpiński*-Teppich entsteht durch **Iteration** der folgenden Konstruktionsvorschrift: Beginnend mit dem **Initiator** ersetze alle **Substituenten** durch den **Generator** [127, 135]. In Abb. 3.5 ist für den im folgenden behandelten Teppich ganz links der Initiator zu sehen, der gleichzeitig der Substituent ist, rechts daneben ist nach der ersten Iteration der Generator dargestellt. Rechts daneben ist das Resultat nach 2 Iterationsschritten gezeigt. Die Notation der Form  $SC_{lq}(k, i)$  wird unten erklärt.



**Abbildung 3.5:** Der *Sierpiński*-Teppich in verschiedenen Iterationstufen. Ganz links der Initiator und Substituent, in der Mitte der Generator, rechts das Ergebnis nach der zweiten Iteration.

Zählt man nun die grau ausgefüllten Flächen, so erkennt man, daß bei einer Verdreifachung der Kantenlänge die Fläche lediglich um den Faktor 8 wächst. Mit der

oben gegebenen Definition der *Hausdorff*-Dimension ist damit die Dimension  $\dim_{\mathcal{H}}(B) = \ln(8)/\ln(3) = 1.89 \dots$ . Es ist Gegenstand der folgenden Untersuchung, ein Gitter mit dieser gebrochenen Dimension zu untersuchen.

### 3.2.2 Das Gitter

Der *Sierpiński*-Teppich, wie er bereits in Abb. 3.5 vorgestellt wurde, stellt die kleinste Variante von allgemeinen *Sierpiński*-Teppichen  $SC_{lq}$  dar, die eine vierfache Rotations-symmetrie aufweisen. In der Bezeichnung  $SC_{lq}$  bedeutet dabei  $l$  die Kantenlänge des Generators und  $q$  die Kantenlänge des innenliegenden Loches. In dem hier untersuchten Fall ist also  $l = 3$  und  $q = 1$ . Die Zahl der Substituenten, aus dem der Generator besteht, ist demnach  $l^D - q^D$ , wobei  $D$  die einbettende Dimension bezeichnet. Nach  $k$  der oben beschriebenen Iterationsschritten besteht das Gitter dann aus  $s_{lq}(k) = (l^D - q^D)^k$  Substituenten. Das Gitter läßt sich jedoch nicht nur durch Iteration vergrößern, sondern auch durch **Expansion**. Dabei werden  $l^D$  Kopien eines *Sierpiński*-Teppichs verwendet, um eine  $D$ -dimensionalen Hyperkubus bestehend aus  $l^D$  Zellen, zu parkettieren bzw. zu dekorieren. Ein  $k$ -fach iterierter und danach  $i$ -fach expandierter *Sierpiński*-Teppich  $SC_{lq}$  wird mit  $SC_{lq}(k, i)$  bezeichnet. Er hat dieselbe Kantenlänge wie ein  $k + i$ -fach iterierter Teppich. Die Teppiche  $SC_{31}(1, 0)$ ,  $SC_{31}(1, 1)$  und  $SC_{31}(2, 0)$  sind in Abb. 3.6 dargestellt. Natürlich führt eine wiederholte Expansion nicht zu einem Fraktal im mathematischen Sinne, sondern lediglich zu einer Parkettierung. Das mathematische Fraktal ist  $SC_{lq}(k, i)$  mit  $k \rightarrow \infty$ .

Die *Ising*-Spins werden nun auf den **sites** plaziert, d.h. in der Mitte der grauen Quadrate in Abb. 3.6. Diese Methode erhält - wie unten gezeigt - die mittlere Zahl nächster Nachbarn und ist in der Literatur etwa gleichberechtigt zur Plazierung auf den **vertices** vertreten ([137, 138] bzw. [139, 140]).

Es ist bereits bekannt [137], daß freie Ränder zu starken Korrekturen führen, daher werden im folgenden periodische Randbedingungen verwendet. Sie haben zur Folge, daß eine Parkettierung die mittlere Zahl nächster Nachbarn nicht ändert. Diese Tatsache macht man sich leicht klar, indem man die periodischen Ränder der Teppiche, mit denen parkettiert werden soll, auftrennt und sie an diesen Stellen zusammenfügt. Es müssen dann keine Bindungen vernichtet oder neue hinzugefügt werden. Die mittlere Zahl der nächsten Nachbarn  $\bar{n}_{ki}$  eines *Sierpiński*-Teppichs  $SC_{lq}(k, i)$  ist dann:

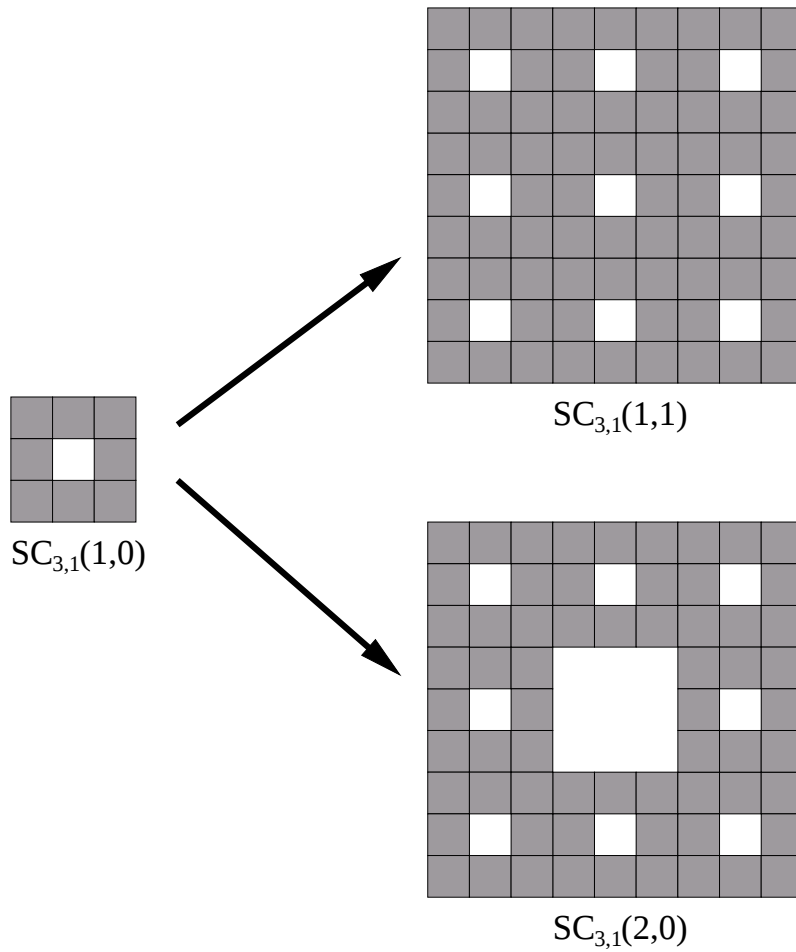
$$\bar{n}_{ki} = 4 - 4q \frac{1 - l^k/(l^2 - q^2)^k}{(l^2 - q^2) - l} \quad (3.20)$$

und insbesondere unabhängig von  $i$ .

Die bisherigen Untersuchungen des *Sierpiński*-Teppich  $SC_{31}(k, i)$  (im folgenden nur noch  $SC(k, i)$ ) sind zum Teil recht alt und die Ergebnisse leiden stark unter den geringen Computer-Ressourcen. Daneben führen methodische Probleme zu kontroversen Ergebnissen [141, 137, 55]. Im folgenden werden diese diskutiert und sowohl das statische als auch das dynamische kritische Verhalten [111, 142, 143, 112] auf dem *Sierpiński*-Teppich untersucht.

### 3.2.3 Statisches kritisches Verhalten

Für die Simulation kritischen Verhaltens im Gleichgewicht wurden aus Gründen der Effizienz Cluster-Algorithmen von *Swendsen* und *Wang* sowie von *Wolff* verwendet, wie sie bereits in 2.2.2 besprochen wurden [90, 92]. Diese Algorithmen in Verbindung mit den



**Abbildung 3.6:** Die verschiedenen Möglichkeiten, einen *Sierpiński*-Teppich zu vergrößern: Oben ist die Expansion dargestellt, unten die Iteration.

leistungsfähigeren Computer-Ressourcen erklären u.a. die Diskrepanz zu früheren Ergebnissen aus den Achtzigern [141, 144].

Die Energie  $\langle E \rangle$  wird als Mittelwert des Hamiltonian

$$\mathcal{H} = -J \sum_{\langle ij \rangle} \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j \quad (3.21)$$

berechnet, wobei  $J > 0$  ferromagnetisch und  $\mathbf{S}_i \in \{-1, 1\}$  klassische *Ising*-Spins. Die Summe läuft über alle Paare nächster Nachbarn. Die Magnetisierung ist der Mittelwert von

$$M = \sum_{i=1}^N \mathbf{S}_i \quad , \quad (3.22)$$

wobei die Summe über alle  $N$  Spins erfolgt. Die Suszeptibilität ist dann durch

$$\chi = \frac{\langle M^2 \rangle - \langle M \rangle^2}{NT} \quad (3.23)$$

definiert. In HTP werden die ungeraden Momente von  $M$  Null gesetzt.

### Die Korrelationslänge

Die Berechnung der Korrelationslänge stellt auf fraktalen Gittern ein Problem dar und wurde daher wie unten beschrieben umgangen. Dennoch soll hier ein Vorschlag gemacht werden, auf welcher Grundlage sie berechnet werden könnte. Dazu zunächst die Herleitung der Berechnung der Korrelationslänge in  $d$ -dimensionalen hyperkubischen Gittern:

Die Korrelationslänge  $\xi$  ist über die verbundene Zweipunktkorrelationsfunktion  $G_c$  definiert (s. 1.1.3) mit  $G_c(r) \propto e^{-r/\xi}$ . Bei periodischen Randbedingungen beobachtet man jedoch bei einem hyperkubischen Gitter

$$\langle s_{0,0,0,\dots,s_{i_0,j_0,k_0,\dots}} \rangle - \langle s \rangle^2 \propto \sum_{i,j,k,\dots=-\infty}^{\infty} e^{-\sqrt{(i_0+iN)^2+(j_0+jN)^2+(k_0+kN)^2+\dots}}/\xi, \quad (3.24)$$

wobei die Zahl der Indizes von der Zahl der Raumdimensionen abhängt. Bei nur einer Raumdimension vereinfacht sich das Problem auf die geometrische Summe. Allgemein geht  $\langle s_{0,0,0,\dots,s_{i_0,j_0,k_0,\dots}} \rangle - \langle s \rangle^2$  in das gesuchte Verhalten der Korrelationsfunktion über, wenn  $N \gg \xi$  erfüllt ist, so daß Beiträge zur Korrelationsfunktion, die von einem oder mehreren Umläufen stammen, keine Rolle mehr spielen.

Für die weitere Diskussion werden Differenzen der Korrelationsfunktion  $G_c(x, y, \dots)$  am Ort  $(x, y, \dots)$  mit  $r = \sqrt{x^2 + y^2 + \dots} \neq 0$  und seiner Umgebung interessieren:

$$\delta G(\delta_x, 0, \dots; x, y, \dots) \equiv G_c(x + \delta_x, y, \dots) - G_c(x, y, \dots) \quad (3.25)$$

$$= G_c(x, y, \dots) \left( e^{-\frac{\sqrt{r^2 + 2\delta_x x + \delta_x^2} - r}{\xi}} - 1 \right). \quad (3.26)$$

Der Exponent läßt sich nun für kleine  $\delta_x/r$  entwickeln:

$$\sqrt{r^2 + 2\delta_x x + \delta_x^2} - r = r \left( \frac{\delta_x x}{r^2} + \mathcal{O}\left(\frac{\delta_x^2}{r^2}\right) + \mathcal{O}\left(\frac{\delta_x^2 x^2}{r^4}\right) \right). \quad (3.27)$$

Damit wird

$$\delta G_c(\delta_x, 0, \dots; x, y, \dots) \approx G_c(x, y, \dots) \left( e^{-\frac{\delta_x x}{r\xi}} - 1 \right). \quad (3.28)$$

Nun soll  $\text{div grad } G_c = \Delta G_c$  als Differenzenquotient gebildet werden. Dazu wird für alle  $d$  Dimensionen  $x_i \neq 0$  angenommen

$$\begin{aligned} \Delta G_c(x_1, x_2, \dots, x_d) &= \delta G_c(1, 0, \dots; x, y, \dots) + \delta G_c(-1, 0, \dots; x, y, \dots) \\ &+ \delta G_c(0, 1, \dots; x, y, \dots) + \delta G_c(0, -1, \dots; x, y, \dots) \\ &+ \dots \end{aligned} \quad (3.29)$$

$$= G_c(x, y, \dots) 2 \sum_{i=1}^d \left( \cosh\left(\frac{x_i}{r\xi}\right) - 1 \right) \quad (3.30)$$

$$\approx G_c(x, y, \dots) \sum_{i=1}^d \frac{x_i^2}{r^2 \xi^2} \quad (3.31)$$

$$= G_c(x, y, \dots) \frac{1}{\xi^2}. \quad (3.32)$$

Diese Näherung wird um so besser, je größer  $r$  und/oder  $\xi$  sind. Solange nur einzelne Komponenten  $x_i = 0$  sind, jedoch  $r \neq 0$ , bleibt die angegebene Näherung (3.27) und damit

(3.32) richtig, da lediglich der erste und der letzte Term in der Klammer wegfallen. Die Situation ändert sich grundlegend für  $r = 0$ , also  $x = y = \dots = 0$ :

$$\delta G_c(\delta_x, 0, \dots; 0, 0, \dots) = G_c(0, 0, \dots) \left( e^{-\frac{\delta_x}{\xi}} - 1 \right) \quad (3.33)$$

Entsprechend ändert sich der Differenzenquotient. Für  $r = 0$  erhält man

$$\delta G_c(1, 0, \dots; 0, 0, \dots) + \delta G_c(-1, 0, \dots; 0, 0, \dots) = 2G_c(0, 0, \dots) \left( e^{-\frac{1}{\xi}} - 1 \right) \quad (3.34)$$

$$\approx G_c(0, 0, \dots) \left( \frac{1}{\xi^2} - \frac{2}{\xi} \right) \quad (3.35)$$

Insgesamt wird damit  $\Delta G_c$

$$-\Delta G_c(x_1, x_2, \dots, x_d) + \frac{1}{\xi^2} G_c(x_1, x_2, \dots, x_d) \approx \prod_i \delta_{x_i, 0} \frac{2}{\xi} G_c(0, 0, \dots) \quad (3.36)$$

mit  $\delta_{x_i, 0}$  dem *Kronecker*-Symbol.

$G_c$  hat die Eigenschaft

$$\begin{aligned} \sum_x (G_c(x+1, y, \dots) + G_c(x-1, y, \dots) - 2G_c(x, y, \dots)) e^{-ik_x x} = \\ 2 \sum_x G_c(x, y, \dots) (\cos(k_x) - 1) e^{-ik_x x} \quad , \end{aligned} \quad (3.37)$$

wenn  $G_c$  wie oben diskutiert periodisch ist. Wenn sie nicht periodisch ist, wie es bisher mit  $G_c \propto e^{-r/\xi}$  implizit angenommen wurde, tritt ein Fehler nur an den Rändern auf. Die Fouriertransformierte von  $\Delta G_c$  ist damit

$$\widetilde{\Delta G_c}(k_1, k_2, \dots) \approx 2 \sum_{i=1}^d (\cos(k_i) - 1) \widetilde{G_c} \quad (3.38)$$

Mit der *Poisson*-Gleichung<sup>2</sup> (3.36) ist dann

$$\left( 2 \sum_{i=1}^d (\cos(k_i) - 1) + \frac{1}{\xi^2} \right) \widetilde{G_c} = 2 \frac{1}{N^{d/2}} G_c(0, 0, \dots) \quad , \quad (3.39)$$

wobei  $N$  die Kantenlänge des Hyperkubus bezeichnet. Gleichung (3.39) stellt eine gebräuchliche Methode zur Bestimmung der Korrelationslänge dar [124]:

$$\widetilde{G_c}^{-1} = c \left( 2 \sum_{i=1}^d (\cos(k_i) - 1) + \frac{1}{\xi^2} \right) \quad (3.40)$$

mit einer Konstanten  $c$  wegen der rechten Seite von (3.39).

Ist das zugrundeliegende Gitter kein Hyperkubus, sondern fraktal, so ändert sich die vorgestellte Herleitung. Als Ansatz für die verbundene Zweipunktkorrelationsfunktion dient bis auf Vorfaktoren nun  $\hat{G}_c$  mit

$$\hat{G}_c(\mathbf{x}) = \sum_{\substack{\mathbf{x}', \mathbf{x}'' \\ \mathbf{x}' - \mathbf{x}'' = \mathbf{x}}} G_c(\mathbf{x}' - \mathbf{x}'') F(\mathbf{x}') F(\mathbf{x}'') \quad (3.41)$$

$$= G_c(\mathbf{x}) \sum_{\substack{\mathbf{x}', \mathbf{x}'' \\ \mathbf{x}' - \mathbf{x}'' = \mathbf{x}}} F(\mathbf{x}') F(\mathbf{x}'') \quad , \quad (3.42)$$

---

<sup>2</sup>Die Differentialgleichung  $\Delta \phi - \kappa^2 \phi = -4\pi \delta(\mathbf{r})$  ist ein gängiger Zugang zur Fouriertransformierten der Korrelationsfunktion [44]. Jedoch ändert sich die *Form* von  $\phi$  für verschiedene Dimensionen.

wobei die  $\mathbf{x}$ ,  $\mathbf{x}'$  und  $\mathbf{x}''$  Vektoren im einbettenden Raum sind und  $G_c$  die oben diskutierte Korrelationsfunktion. Die  $F(\mathbf{x})$  stellen das Gitter dar; es ist  $F(\mathbf{x}) = 1$ , wenn an der Stelle  $\mathbf{x}$  ein Gitterplatz existiert, ansonsten ist  $F(\mathbf{x}) = 0$ . Die zugrundeliegende Idee ist, daß sich im Prinzip an der Korrelation nichts ändert bis auf den Umstand, daß die Beiträge für solche Distanzen  $\mathbf{x}' - \mathbf{x}''$  geringer werden, wenn diese seltener im Gitter auftreten. Es ist keineswegs erwiesen, daß sich dieser Ansatz bewähren muß. Mit

$$\sum_{\substack{\mathbf{x}', \mathbf{x}'' \\ \mathbf{x}' - \mathbf{x}'' = \mathbf{x}}} F(\mathbf{x}') F(\mathbf{x}'') = \sum_{\mathbf{x}'} F(\mathbf{x}') F(\mathbf{x}' - \mathbf{x}) = \sum_{\mathbf{x}'} F(\mathbf{x}') F(\mathbf{x} - \mathbf{x}') \quad (3.43)$$

läßt sich der Term als Faltung auffassen, wobei  $F(\mathbf{x}) = F(-\mathbf{x})$  verwendet wurde. Die Fouriertransformierte einer Faltung ist bis auf Vorfaktoren das Produkt der Fouriertransformierten und umgekehrt, also  $\widetilde{G}_c = \widetilde{G}_c * \widetilde{F}^2$ , wobei  $*$  die Faltung bezeichnet. Damit wird aus (3.40)

$$\widetilde{G}_c = \frac{c'}{\left(2 \sum_{i=1}^d (\cos(k_i) - 1) + \frac{1}{\xi^2}\right)} * \widetilde{F}^2 \quad (3.44)$$

Erste Untersuchungen dieses Ansatzes zeigen, daß er kompatible numerische Ergebnisse liefert. Er wurde jedoch nicht systematisch geprüft und wird daher im folgenden auch nicht eingesetzt.

### 3.2.4 Probleme des FSS und Ergebnisse

Um FSS-Korrekturen zu vermeiden, muß nun  $\xi \ll L$  sichergestellt werden, ohne  $\xi$  eigentlich zu berechnen. Da ein expandierter *Sierpiński*-Teppich  $SC(k, i)$  nur eine Zahl miteinander verknüpfter *Sierpiński*-Teppiche  $SC(k, 0)$  darstellt und auch die mittlere Zahl nächster Nachbarn in beiden dieselbe ist, ist deren thermodynamisches Verhalten identisch, solange die Korrelationslänge nicht die Bedingung  $\xi \ll l_{k,0}$  verletzt, mit  $l_{k,0}$  als Kantenlänge des kleineren der beiden Teppiche. Umgekehrt ist ein Abweichen ein eindeutiges Zeichen für die Verletzung von  $\xi \ll l_{k,0}$ .

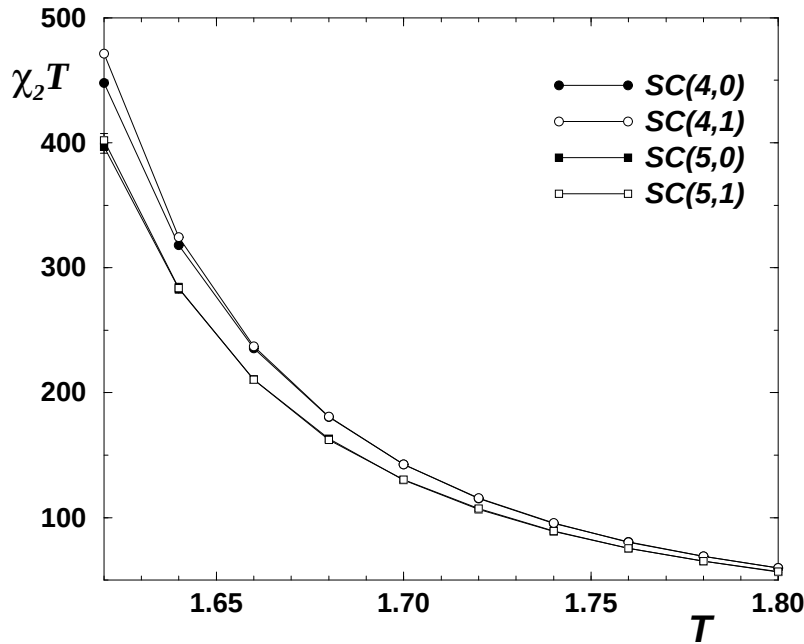
In der Nähe der kritischen Temperatur, dort also wo längst  $\xi \gg L$ , tief im FSS, sollte sich ein Gitter vom Typ  $SC(k, \infty)$  verhalten wie ein 2D-*Ising*, denn jede  $SC(k, 0)$ -Teilmenge läßt sich als *Kadanoff*-Blockspin betrachten. Dieses *Ising*-Limit wird im folgenden *nicht* betrachtet werden.

Um zu prüfen, ob die Methode des FSS in einem fraktalen Gitter zulässig ist, wurde in Abb. 3.7 der Verlauf von  $\chi$  in HTP für verschiedene *Sierpiński*-Teppiche dargestellt (die Daten befinden sich auch in Tabelle 3.3), nämlich für  $SC(4, 0)$  und  $SC(5, 0)$  sowie deren expandierte Fassungen  $SC(4, 1)$  und  $SC(5, 1)$ . In denjenigen Temperaturbereichen, in denen sich  $SC(4, 0)$  eindeutig wie  $SC(4, 1)$  verhält und  $SC(5, 0)$  eindeutig wie  $SC(5, 1)$ , also die Bedingung  $\xi \ll l_{k,0}$  klar erfüllt ist, ist jedoch das Verhalten von  $SC(4, 0)$  völlig verschieden von  $SC(5, 0)$ . Daraus folgt, daß die beiden Gitter in keinem hierarchischen Verhältnis zu einander stehen:  $SC(5, 0)$  ist *nicht* die größer skalierte Fassung von  $SC(4, 0)$ . Um aber FSS einzusetzen, muß  $SC(k, 0)$  in  $k$  skaliert werden, um im Verlaufe der Skalierung bei der mathematisch korrekten Fassung des Fraktals bei  $SC(\infty, 0)$  anzulangen. Da die Verhalten offenbar drastisch voneinander abweichen, muß man die  $SC(k, 0)$  für verschiedene  $k$  als verschiedene Systeme betrachten und die - naheliegende - Form des Skalierens in  $k$  ist unzulässig, FSS verboten: In (2.74) müßte  $\Phi$  durch  $\Phi_k$  ausgetauscht werden und  $T_c$  durch  $T_{c_k}$ . Dieses Verbot der Methode des FSS beantwortet die Frage, weshalb die hier dargestellten Ergebnisse von denen in der Literatur abweichen (siehe Tabelle III in [137],

| Referenz             | $\gamma$       | $\beta$        |
|----------------------|----------------|----------------|
| <i>Bonnier</i> [138] | 2.2            |                |
| <i>Monceau</i> [137] | 2.754(25)      | 0.127(6)       |
| <i>diese Arbeit</i>  | $\approx 2.05$ | $\approx 0.12$ |

**Tabelle 3.1:** Die bekannten Ergebnisse für das Gitter  $SC_{31}$  mit den Spins auf den Sites und periodischen Rändern. Die Ergebnisse in dieser Arbeit sind verschieden für verschiedene Gitter und daher nur ungefähr angegeben (s. Tabellen 3.2-3.4)

auszugsweise in Tabelle 3.1). Das Verbot von FSS bedeutet zusätzlich, daß für  $SC(k, 0)$  *verschiedene* kritische Exponenten gefunden werden sollten und nur asymptotisch die des  $SC(\infty, 0)$ .<sup>3</sup>



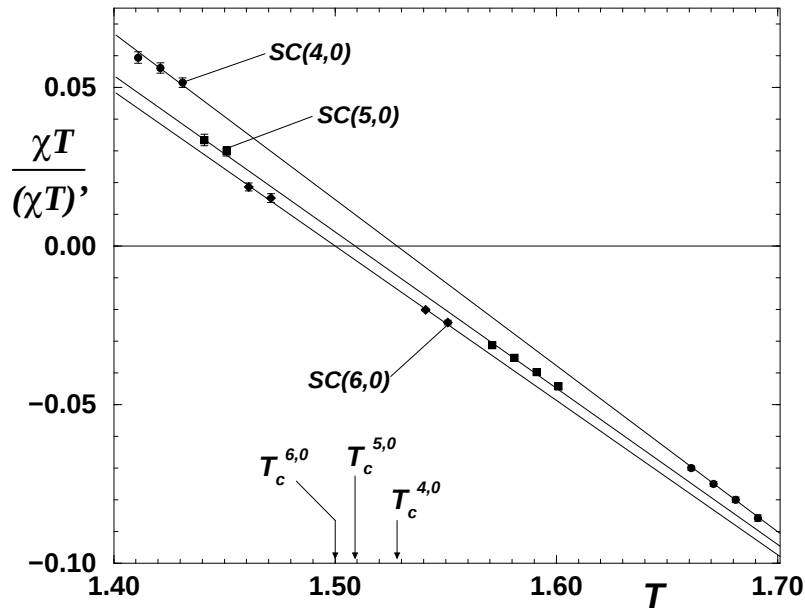
**Abbildung 3.7:** Verhalten von  $\chi T$  in HTP für verschiedene Gitter. Das größer iterierte Gitter  $SC(5, 0)$  verhält sich nicht wie das kleinere  $SC(4, 0)$ , das sich jedoch über einen breiten Temperaturbereich verhält wie  $SC(4, 1)$ , die expandierte Version von  $SC(4, 0)$ , ebenso wie sich  $SC(5, 0)$  verhält wie  $SC(5, 1)$ , solange die Korrelationslänge klein genug ist.

Im kritischen Bereich und außerhalb des FSS können die kritischen Exponenten der Systeme  $SC(k, 0)$  beobachtet werden. Ein direkter Fit von  $\chi$  oder  $M$  gegen eine Gleichung der Form

$$\chi T = \chi_0^\pm |T - T_c|^{-\gamma} (1 + \text{correct.}) \quad (3.45)$$

<sup>3</sup>Es überrascht zunächst, daß sich  $SC(k, 0) \subset SC(k+1, 0)$  nicht verhält wie  $SC(k+1, 0)$ , obgleich es sich verhält wie  $SC(k, 1)$ . Daraus folgt jedenfalls, daß es keine Methode gibt, um den Teppich auf befriedigende Weise zu skalieren, also insbesondere unter Einhaltung der Iterationsregeln, die nur  $SC(k, 0)$  mit wachsendem  $k$  zulassen. Aber ist dann das oben genannte Kriterium für  $\xi \ll l_{k,0}$  noch haltbar, oder handelt es sich dabei möglicherweise lediglich um einen Artefakt? Nein. Die oben beschriebene Methode zur Sicherung von  $\xi \ll l_{k,0}$  beruht nicht auf der These, daß  $SC(k, 1)$  die vergrößerte, skalierte Fassung von  $SC(k, 0)$  ist, sondern einzig auf der Tatsache, daß  $SC(k, 1)$  ein Gitter vom Typ  $SC(k, 0)$  ist, bei dem in die periodischen Ränder Gitter vom selben Typ eingefügt wurden – im Gegensatz zu  $SC(k+1, 0)$ , welches das Eliminieren von *Bonds* erfordert.

mit  $\chi_0^\pm$  wie in (3.1) bietet dazu den Zugang. Aufgrund der Unsicherheit von  $T_c$  und der unbekannten Korrekturen sind die Ergebnisse jedoch mit großen Fehlern behaftet. Einen „gutmütigeren“ Zugang bietet nun die in Abschnitt 3.1 entwickelte Methode. Ein Plot von  $(\chi T)/(\chi T)'$  ist in Abb. 3.8 für verschiedene Gitter dargestellt. Alle eingezeichneten Punkte sind gültig im Sinne von  $\xi \ll l_{k,0}$ , was mit einem Vergleich mit dem expandierten Gitter sichergestellt wurde. Lediglich im Falle  $SC(6,0)$  konnte dieses Kriterium nicht gewährleistet werden, da  $SC(6,1)$   $18 \cdot 2^{18}$  Spins enthält und damit mit den zur Verfügung stehenden Ressourcen nicht zugänglich ist.



**Abbildung 3.8:** Ergebnisse für  $\chi T/(\chi T)'$  für verschiedene Gitter. Die Steigung ergibt das Inverse des Exponenten  $\gamma$ , der Schnitt mit der Nulllinie die kritische Temperatur (s.3.1).

Man erkennt in Abb. 3.8 deutlich das Absinken der kritischen Temperatur, dem Schnittpunkt mit der Nulllinie, mit steigenden  $k$ , was auf die sinkende Zahl nächster Nachbarn zurückzuführen ist. Auch die Steigung  $1/\gamma$  ändert sich systematisch, aber nicht drastisch, wie in Tabelle 3.2 oben aufgelistet. Die Anwendung derselben Methoden, direkt und  $M/M'$ , auf  $M$  ergeben die in Tabelle 3.2 unten aufgelisteten Ergebnisse.

Die Ergebnisse der statischen Analyse sind insofern vorsichtig zu betrachten, als daß sie von einer sehr geringen Zahl von Datenpunkten stammen. Daneben sind sie nicht symmetrisch um  $T_c$  verteilt, was für die Fit-Methode nicht optimal ist. Dies ist wiederum darauf zurückzuführen, daß der kritische Bereich in LTP sehr schmal ist. Dennoch sind diese Ergebnisse methodisch unzweifelhaft. Nun sollen sie mit denen aus dem dynamischen Verhalten der Systeme verglichen werden.

## Statische Ergebnisse tabellarisch

| Gitter    | $T_c (\chi/\chi')$ | $\gamma$ aus $\chi/\chi'$ | $\gamma$ direkt (nur HTP) |
|-----------|--------------------|---------------------------|---------------------------|
| $SC(4,0)$ | 1.5266(11)         | 1.911(15)                 | 1.901(36)* <sup>1</sup>   |
| $SC(5,0)$ | 1.5081(12)         | 2.030(35)                 | 2.069(8)* <sup>1</sup>    |
| $SC(6,0)$ | 1.4992(11)         | 2.055(54)                 |                           |

| Gitter    | $T_c (M/M')$ | $\beta$ aus $M/M'$ | $\beta$ direkt (nur LTP) |
|-----------|--------------|--------------------|--------------------------|
| $SC(4,0)$ | 1.52607(84)  | 0.0961(9)          | 0.1043(9)* <sup>1</sup>  |
| $SC(5,0)$ | 1.51276(44)  | 0.1230(9)          | 0.1221(6)* <sup>1</sup>  |
| $SC(6,0)$ | 1.49793(55)  | 0.1373(30)         |                          |

**Tabelle 3.2:** Ergebnisse der Exponenten  $\gamma$  und  $\beta$  für das statische Verhalten. Es sind je zwei Schätzer angegeben, einer resultierend aus der  $\chi/\chi'$ -Methode, der andere aus einem direkten Fit gegen (3.45). Die Markierung \*<sup>1</sup> zeigt an, daß hier die kritische Temperatur resultierend aus einem  $\chi/\chi'$ -Fit angewandt auf  $\chi$  eingesetzt wurde.

| Gitter      | $T$  | $M$                       | $\chi T$                 | $\chi T/(\chi T)'$         |
|-------------|------|---------------------------|--------------------------|----------------------------|
| SC(4,0) LTP | 1.41 | 0.875247(90)              | 4.692(43) <sup>*3</sup>  | 0.059(2)                   |
|             | 1.42 | 0.867195(98)              | 5.610(57) <sup>*3</sup>  | 0.056(2)                   |
|             | 1.43 | 0.85829(11)               | 6.713(71) <sup>*3</sup>  | 0.051(1)                   |
|             | 1.45 | 0.83794(13) <sup>*2</sup> | 10.21(12) <sup>*3</sup>  | 0.044(1) <sup>*2</sup>     |
|             | 1.47 | 0.81238(17) <sup>*2</sup> | 16.64(19) <sup>*3</sup>  | 0.0373(8) <sup>*2</sup>    |
| SC(4,0) HTP | 1.62 |                           | 447.8(12) <sup>*2</sup>  | -0.05624(38) <sup>*2</sup> |
|             | 1.63 |                           | 375.7(11) <sup>*2</sup>  | -0.05915(44) <sup>*2</sup> |
|             | 1.64 |                           | 317.94(96) <sup>*2</sup> | -0.06241(50) <sup>*2</sup> |
|             | 1.65 |                           | 271.81(85)               | -0.06677(58)               |
|             | 1.66 |                           | 235.33(76)               | -0.06999(66)               |
|             | 1.67 |                           | 205.20(67)               | -0.07494(75)               |
|             | 1.68 |                           | 180.43(60)               | -0.07998(86)               |
|             | 1.69 |                           | 159.40(54)               | -0.08575(98)               |
|             | 1.70 |                           | 142.62(49)               | -0.0897(11) <sup>*1</sup>  |
|             | 1.72 |                           | 115.41(40)               | -0.1001(13) <sup>*1</sup>  |
|             | 1.74 |                           | 95.33(34)                | -0.1121(16) <sup>*1</sup>  |
|             | 1.76 |                           | 80.72(29)                | -0.1231(19) <sup>*1</sup>  |
|             | 1.78 |                           | 69.03(25)                | -0.1341(22) <sup>*1</sup>  |
|             | 1.80 |                           | 59.71(22)                | -0.1470(26) <sup>*1</sup>  |
|             | 1.82 |                           | 52.39(19)                | -0.1588(29) <sup>*1</sup>  |
|             | 1.84 |                           | 46.47(17)                | -0.1708(33) <sup>*1</sup>  |
| SC(4,1) LTP | 1.41 | 0.875258(30)              | 4.686(23)                | 0.0597(24)                 |
|             | 1.43 | 0.858315(36)              | 6.722(40)                | 0.0507(20)                 |
|             | 1.45 | 0.837820(45)              | 10.471(82)               | 0.0386(20)                 |
|             | 1.47 | 0.811988(61)              | 19.49(24)                | 0.0256(15)                 |
| SC(4,1) HTP | 1.62 |                           | 471.1(17) <sup>*2</sup>  | -0.05624(38) <sup>*2</sup> |
|             | 1.63 |                           | 385.3(14)                | -0.0555(14)                |
|             | 1.64 |                           | 324.4(12)                | -0.0594(15)                |
|             | 1.65 |                           | 275.7(10)                | -0.0636(17)                |
|             | 1.66 |                           | 237.07(87)               | -0.0702(21)                |
|             | 1.68 |                           | 180.90(67)               | -0.0792(26)                |
|             | 1.70 |                           | 142.63(53)               | -0.0897(32)                |
|             | 1.72 |                           | 115.54(43)               | -0.1013(40)                |
|             | 1.74 |                           | 95.63(36)                | -0.1111(47)                |
|             | 1.76 |                           | 80.36(30)                | -0.1235(57)                |
|             | 1.78 |                           | 68.92(26)                | -0.1352(66)                |
|             | 1.80 |                           | 59.79(22)                | -0.1494(79)                |

| Gitter      | $T$  | $M$                        | $\chi T$                               | $\chi T/(\chi T)'$                       |
|-------------|------|----------------------------|----------------------------------------|------------------------------------------|
| SC(5,0) LTP | 1.42 | 0.846953(72)* <sub>4</sub> | 15.28(15)* <sub>3</sub>                | 0.0394(20)* <sub>4</sub>                 |
|             | 1.43 | 0.834709(81)               | 19.73(20)* <sub>3</sub>                | 0.0373(21)                               |
|             | 1.44 | 0.820901(94)               | 26.05(29)* <sub>3</sub>                | 0.0334(18)                               |
|             | 1.45 | 0.80505(11)                | 35.69(45)* <sub>3</sub>                | 0.0299(15)                               |
| SC(5,0) HTP | 1.56 |                            | 1892.7(66)* <sub>2</sub>               | -0.02843(35)* <sub>2</sub>               |
|             | 1.57 |                            | 1346.8(50)                             | -0.03121(45)                             |
|             | 1.58 |                            | 998.9(39)                              | -0.03520(59)                             |
|             | 1.59 |                            | 764.9(30)                              | -0.03980(76)                             |
|             | 1.60 |                            | 600.3(24)                              | -0.04421(94)                             |
|             | 1.62 |                            | 396.6(52)* <sub>6</sub>                | -0.0522(40)* <sub>6</sub>                |
|             | 1.64 |                            | 283.4(37)* <sub>6</sub>                | -0.0657(63)* <sub>6</sub>                |
|             | 1.65 |                            | 243.2(10)                              | -0.0693(22)* <sub>1</sub>                |
|             | 1.66 |                            | 210.4(28)* <sub>6</sub>                | -0.0740(79)* <sub>6</sub>                |
|             | 1.68 |                            | 163.0(22)* <sub>6</sub>                | -0.0842(98)* <sub>6</sub>                |
|             | 1.70 |                            | 130.2(17)* <sub>6</sub>                | -0.098(13)* <sub>6</sub>                 |
|             | 1.72 |                            | 106.6(14)* <sub>6</sub>                | -0.095(12)* <sub>6</sub>                 |
|             | 1.74 |                            | 88.9(12)* <sub>6</sub>                 | -0.118(18)* <sub>6</sub>                 |
|             | 1.76 |                            | 75.6(10)* <sub>6</sub>                 | -0.133(22)* <sub>6</sub>                 |
|             | 1.78 |                            | 65.2(9)* <sub>6</sub>                  | -0.154(29)* <sub>6</sub>                 |
|             | 1.80 |                            | 56.6(8)* <sub>6</sub>                  | -0.162(31)* <sub>6</sub>                 |
| SC(5,1) LTP | 1.45 | 0.805079(40)               | 35.41(27)                              | 0.032(36)* <sub>5</sub>                  |
|             | 1.46 | 0.786814(47)               | 51.17(52)                              | 0.027(16)* <sub>5</sub>                  |
| SC(5,1) HTP | 1.56 |                            | 1917.2(73)                             | -0.02578(93)                             |
|             | 1.57 |                            | 1354.2(52)                             | -0.0303(13)                              |
|             | 1.58 |                            | 997.6(39)                              | -0.0355(17)                              |
|             | 1.59 |                            | 762.8(30)                              | -0.0390(21)                              |
|             | 1.60 |                            | 602.1(79)* <sub>6</sub>                | -0.042(8)* <sub>6</sub>                  |
|             | 1.62 |                            | 402.0(54)* <sub>6</sub>                | -0.058(15)* <sub>6</sub>                 |
|             | 1.64 |                            | 283.7(38)* <sub>6</sub>                | -0.063(17)* <sub>6</sub>                 |
|             | 1.66 |                            | 210.5(28)* <sub>6</sub>                | -0.073(22)* <sub>6</sub>                 |
|             | 1.68 |                            | 162.2(22)* <sub>6</sub>                | -0.080(26)* <sub>6</sub>                 |
|             | 1.70 |                            | 130.5(18)* <sub>6</sub>                | -0.098(38)* <sub>6</sub>                 |
|             | 1.72 |                            | 107.4(14)* <sub>6</sub>                | -0.114(51)* <sub>6</sub>                 |
|             | 1.74 |                            | 89.4(12)* <sub>6</sub>                 | -0.100(38)* <sub>6</sub>                 |
|             | 1.76 |                            | 75.4(10)* <sub>6</sub>                 | -0.114(48)* <sub>6</sub>                 |
|             | 1.78 |                            | 65.2(9)* <sub>6</sub>                  | -0.107(41)* <sub>6</sub>                 |
|             | 1.80 |                            | 56.8(8)* <sub>6</sub>                  | -0.222(175)* <sub>6</sub> * <sub>5</sub> |
| SC(6,0) LTP | 1.45 | 0.782962(85)* <sub>4</sub> | 111.5(14)* <sub>4</sub> * <sub>3</sub> | 0.022(2)* <sub>4</sub>                   |
|             | 1.46 | 0.75731(11)                | 185.3(29)* <sub>3</sub>                | 0.0186(12)                               |
|             | 1.47 | 0.72515(15)                | 340.7(60)* <sub>3</sub>                | 0.0151(14)                               |
|             | 1.48 | 0.68149(23)* <sub>2</sub>  | 785(14)* <sub>2</sub>                  | 0.0102(7)* <sub>2</sub> * <sub>3</sub>   |
| SC(6,0) HTP | 1.52 |                            | 13576(42)* <sub>2</sub>                | -0.01283(18)* <sub>2</sub>               |
|             | 1.53 |                            | 6746(23)* <sub>2</sub>                 | -0.01621(33)* <sub>2</sub>               |
|             | 1.54 |                            | 3869(14)                               | -0.02016(52)                             |
|             | 1.55 |                            | 2445.9(91)                             | -0.02414(76)                             |

**Tabelle 3.3:** Numerische Ergebnisse des statischen Verhaltens. Die folgenden Markierungen wurden verwendet: \*<sub>1</sub> Der Wert ist vermutlich zu weit von der kritischen Temperatur entfernt, so daß höhere Ordnungen im Fit berücksichtigt werden müßten. \*<sub>2</sub> FSS hat eingesetzt. \*<sub>3</sub> Ein Fit von  $\chi T$  konvergiert sehr (zu) langsam. \*<sub>4</sub> Nicht kritisch (zu weit von der kritischen Temperatur entfernt). \*<sub>5</sub> Starke numerische Fehler. \*<sub>6</sub> Daten aus einem kurzen Lauf (MCS für Gleichgewicht:  $10^4$ , für Statistik:  $10^5$ )

### 3.2.5 Dynamisches kritisches Verhalten

Aus zwei Gründen sind die kritischen Exponenten aus statischem kritischem Verhalten auf fraktalen Gittern problematisch:

- Die leistungsfähigste Methode, das FSS, ist nicht anwendbar
- Außerhalb des FSS, wo  $\xi \ll L$  sein muß, stellen die verschiedenen  $SC(k, 0)$  verschiedene Systeme dar. Größere Realisierungen, deren Exponenten näher an den vermuteten asymptotischen liegen, benötigen für jeden Iterationsschritt 8 mal soviel Zeit.

Es ist daher dringend erforderlich, die Ergebnisse noch von anderer Seite her zu stützen.

Einen FSS-freien Zugang zu kritischen Exponenten bietet das dynamische kritische Verhalten, wie es bereits in Abschnitt 2.5 vorgestellt wurde. Im folgenden wird es auf die fraktalen Gitter angewandt.

### 3.2.6 Simulationen

In den hier durchgeführten Simulationen wurde als Ausgangskonfiguration die ferromagnetische Ordnung, also  $M = 1$  bei  $T = 0$ , gewählt. Danach wurden 500 Heatbath-Evolutionsschritte bei  $T = T_c$  angewandt. Um genügend Statistik zu erzeugen, wurde diese Prozedur  $2 \cdot 10^4$  mal wiederholt. Für  $T_c$  wurden die Ergebnisse aus der statischen Analyse verwendet. Um den Fehler auf Grund der Unsicherheit von  $T_c$  abschätzen zu können, wurden darüberhinaus für die Gitter  $SC(4, 0)$  und  $SC(5, 0)$  Simulationen bei  $T_c \pm \sigma(T_c)$  durchgeführt. Das Gitter  $SC(6, 0)$  konnte auf Grund limitierter Computer-Ressourcen nur bei einer Temperatur simuliert werden und der Fehler von  $SC(6, 0)$  ist daher von  $SC(5, 0)$  extrapoliert und somit wenig verlässlich, zumal dessen Schätzung für  $T_c$  auf sehr wenigen Datenpunkten beruht, die darüberhinaus nicht durch das expandierte Gitter abgesichert werden konnten.

Wie bereits in Abschnitt 2.5 diskutiert, wurden die Größen

$$\langle M \rangle_t \propto t^{-\beta/(\nu z)} \quad (3.46)$$

$$\chi_t = \frac{\langle M^2 \rangle_t - \langle M \rangle_t^2}{T} \propto t^{-\gamma/(\nu z)} \quad (3.47)$$

$$V_{1t} = \frac{\langle ME \rangle_t}{\langle M \rangle_t} - \langle E \rangle_t \propto t^{-1/(\nu z)} \quad (3.48)$$

berechnet, wobei  $t$  die Zahl der Evolutionsschritte bezeichnet.

Exemplarisch sind die Ergebnisse von  $\langle M \rangle_t$  als Funktion von  $t$  in Abb. 3.9 dargestellt. Um die Exponenten effizient zu bestimmen, wurde  $\langle M \rangle_t$  als Funktion von  $V_{1t}$  doppeltlogarithmisch aufgetragen (Abb. 3.10). Die Steigung ergibt  $\beta$ . Entsprechend wurde mit  $\chi_t$  verfahren, die Steigung ergibt hier  $\gamma$ . Der dynamische Exponent  $z$  ergibt sich zusammen mit  $\nu$  als Steigung der doppeltlogarithmischen Darstellung von  $V_{1t}$  gegen  $t$  (Abb. 3.11).

Um den Einfluß der Zeit  $t_{mic}$  zu minimieren, wurden alle Datenpunkte  $t < t_{mic}$  vom linearen Fit ausgeschlossen. Die Zeit  $t_{mic}$  wurde bestimmt, indem die Datensätze in Scheiben  $[t_i < t_{i+1}]$  zerlegt wurden, wobei  $t_{i+1} = t_i + 10$ . Wenn sich die Ergebnisse ab einem bestimmten  $i_0$  nicht mehr veränderten, war damit  $t_{mic} \leq t_{i_0}$  bestimmt. Für größere  $i$  treten wieder starke Fluktuationen auf, da hier die Datenpunkte in einer doppeltlogarithmischen Darstellung immer dichter liegen. Für  $SC(4, 0)$  ergab sich  $t_{mic} \leq 80$ , für  $SC(5, 0)$  und  $SC(6, 0)$   $t_{mic} \leq 100$ . Die Ergebnisse dieser Fits sind in Tabelle 3.4 aufgeführt.

Beide Methoden, die statische und die dynamische, liefern zwei unabhängige statische Exponenten, nämlich  $\gamma$  und  $\beta$ . Sie sind direkt miteinander vergleichbar und konsistent.

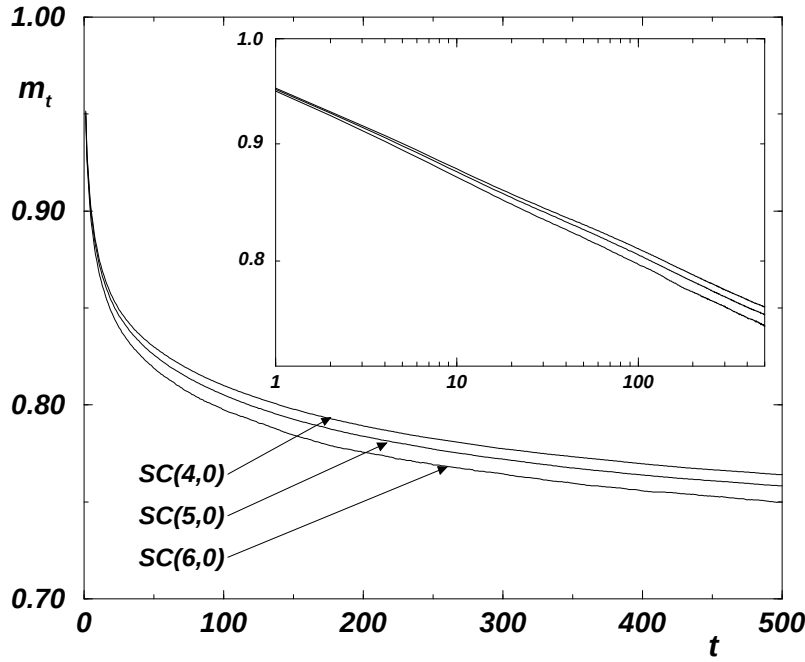


Abbildung 3.9:  $\langle M \rangle_t$  gegen  $t$  für verschiedene Teppiche.

| Gitter     | $V_1(t) \rightarrow \nu z$ | $\chi(V_1) \rightarrow \gamma$ | $M(V_1) \rightarrow \beta$ |
|------------|----------------------------|--------------------------------|----------------------------|
| $SC(4, 0)$ | 3.06(11)                   | 1.959(32)                      | 0.1154(29)                 |
| $SC(5, 0)$ | 3.21(15)                   | 2.048(49)                      | 0.1200(55)                 |
| $SC(6, 0)$ | [2.81(20)]                 | [1.913(67)]                    | [0.1019(74)]               |

Tabelle 3.4: Ergebnisse für die kritischen Exponenten aus dem dynamischen kritischen Verhalten. Die Ergebnisse des  $SC(6, 0)$  sind zweifelhaft (s. Text).

### 3.2.7 Berechnung des Fehlers der Exponenten

Für die Berechnung der Fehler dient im Falle der Exponenten aus statischen kritischen Verhalten der Jackknife, wie er in Abschnitt 2.3 vorgestellt wurde. Auch im Falle dynamischem kritischen Verhalten wurde zunächst folgender Ansatz gewählt (im folgenden **direkte Methode** genannt):

Obwohl zunächst nicht benötigt, werden alle Konfigurationen  $\Sigma_t^i$ , die im  $i$ ten Lauf zur Zeit  $t$  produziert wurden, in einer geordneten Menge gesammelt:

$$S_t = \{\Sigma_t^1, \Sigma_t^2, \dots, \Sigma_t^N\} \quad , \quad (3.49)$$

wobei  $N$  die Zahl der Läufe bezeichnet und  $1 \leq t \leq t_{max}$ , wobei  $t_{max}$  die maximale Zeit. Gleichzeitig ist  $N$  die Zahl *unabhängiger* samples: Das ist leicht einzusehen, da alle Simulationen mit der gleichen Startkonfiguration beginnen und auf Grund dieser Präparation alle Korrelationen zwischen den einzelnen Läufen vernichtet werden. Jede benötigte thermodynamische Größe wird nun für jede Konfiguration berechnet; beispielsweise die Magnetisierung zum Zeitpunkt  $t$  ergibt sich dann als

$$M_t = \frac{1}{N} \sum_i^N M(\Sigma_t^i) \quad . \quad (3.50)$$

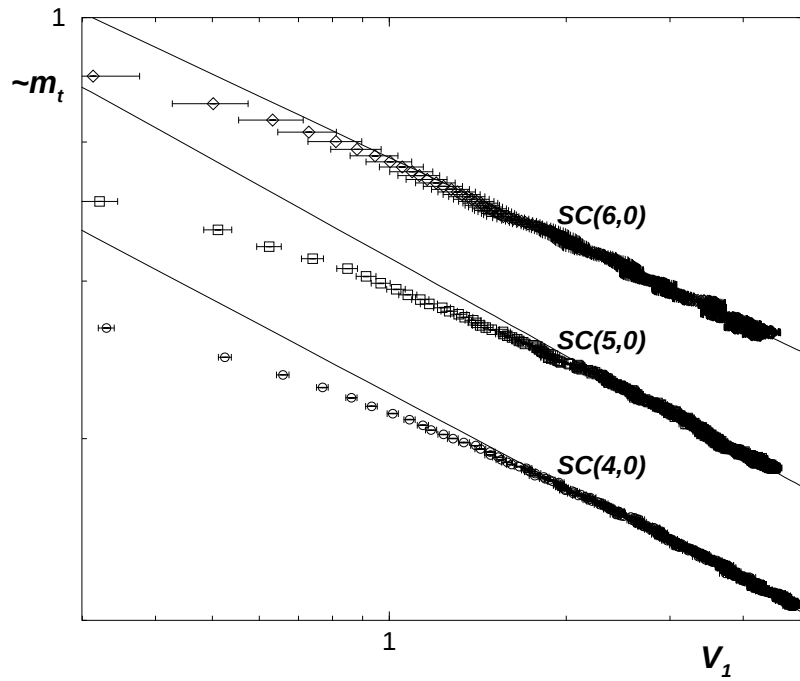


Abbildung 3.10:  $\langle M \rangle_t$  gegen  $V_{1t}$  doppeltlogarithmisch für verschiedene Teppiche.

Die Standardabweichung könnte dann ebenfalls auf die übliche Weise berechnet werden:

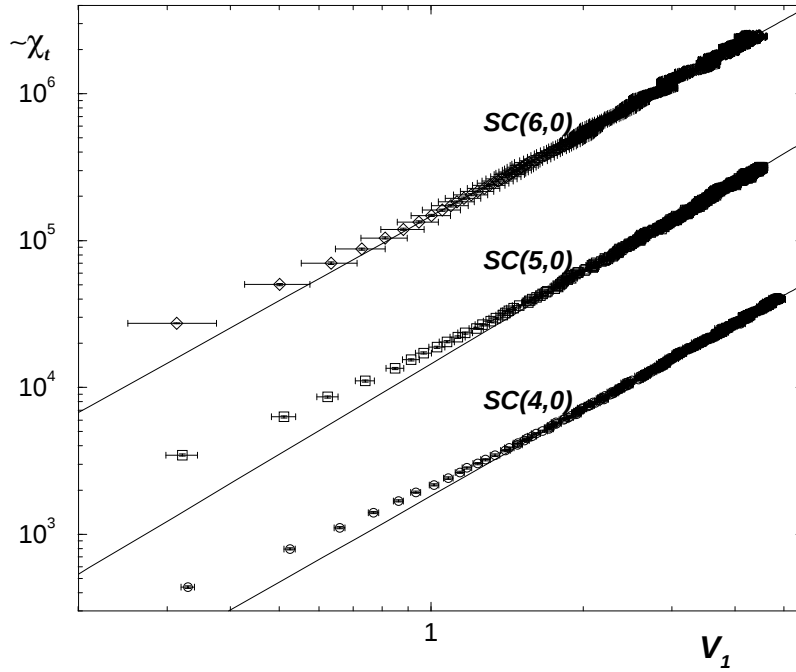
$$\sigma^2(M_t) = \frac{1}{N} \sum_i^N (M(\Sigma_t^i) - M_t)^2 \quad . \quad (3.51)$$

Für kompliziertere Fälle wäre wiederum der Jackknife anzuwenden, wie er in Abschnitt 2.3 beschrieben wurde, etwa für  $V_{1t}$  und seinen Fehler. Über den Logarithmus dieser Daten könnten dann die Schätzer der kritischen Exponenten, allgemein  $\mu$ , und deren Fehler bestimmt werden. Obwohl im Prinzip lediglich ein Satz von Schätzern thermodynamischer Größen und deren Fehler für die Berechnung irgendeines kritischen Exponenten benötigt wird, sollen diese Details allesamt in der Schätzerfunktion  $\mu$  versteckt werden, die eine Funktion aller geordneten Mengen  $S_t$  darstellt:

$$\mu = \mu(S_1, S_2, \dots, S_{t_{max}}) \quad . \quad (3.52)$$

Unglücklicherweise stellt sich dieser einfache Zugang als falsch heraus. Wenngleich sich auch bei einer genaueren Analyse herausstellt, daß tatsächlich alle Mengen  $S_t$  aus unabhängigen Konfigurationen bestehen, so sind die Mengen  $S_t$  untereinander nicht nur durch die Korrelationen verbunden, die untersucht werden sollen und von den Formeln (3.46) - (3.48) beschrieben werden, sondern darüberhinaus noch durch die „naive Methode“, in der sie erzeugt werden. Mit „naiv“ soll hier der Umstand bezeichnet werden, daß für jede Konfiguration lediglich ein einziger Nachfolger produziert wird, statt den gesamten zur Verfügung stehenden Phasenraum auszuschöpfen. Und mehr noch: Untypische Konfigurationen produzieren möglicherweise untypische Nachfolger und wenn „die Evolution einmal auf die schiefe Bahn gerät“, ist sie nicht mehr repräsentativ.

Das Jackknife-subsampling Verfahren, das in Abschnitt 2.3 diskutiert wurde, kann jedoch auch hier angewendet werden. Die *subsamples*  $S_t^{J_i}$  werden erzeugt, indem alle



**Abbildung 3.11:**  $\chi_t$  gegen  $V_{1t}$  doppeltlogarithmisch für verschiedene Teppiche.

Konfigurationen des  $i$ ten Laufs aus allen Mengen  $S_t$  entfernt werden:

$$S_t^{J_i} = \{\Sigma_t^1, \Sigma_t^2, \dots, \Sigma_t^{i-1}, \Sigma_t^{i+1}, \dots, \Sigma_t^N\} = S_t \setminus \{\Sigma_t^i\} \quad . \quad (3.53)$$

Auf jede dieser neuen Mengen wird nun der Exponenten-Schätzer  $\mu$  angewendet und man erhält  $\mu^{J_i} = \mu(S_1^{J_i}, S_2^{J_i}, \dots, S_{t_{max}}^{J_i})$ . Der Mittelwert dieser Schätzer,

$$\mu^J = \frac{1}{N} \sum_i^N \mu^{J_i} \quad (3.54)$$

repräsentiert den Jackknife-Schätzer des Exponenten und

$$\sigma^2(\mu^J) = \frac{N-1}{N} \sum_i^N (\mu^{J_i} - \mu^J)^2 \quad (3.55)$$

ist dessen Standardabweichung. Die Berechnung des Schätzers innerhalb der Funktion  $\mu$  ist unabhängig von dem hier beschriebenen subsampling. Es ist daher möglich, zusätzlich in dieser Funktion den Jackknife einzusetzen.

In Abb. 3.13 sind die verschiedenen Ergebnisse dargestellt, welche die beiden Methoden, die direkte und die eben beschriebene, produzieren. Dabei wurde der Datensatz des dynamischen Laufes  $\langle M \rangle_t$  von  $SC(5,0)$  in 10 gleich große, disjunkte Datensätze zerlegt (**binning**) und beide Methoden angewandt, um die Exponenten und deren Fehler auf Grundlage dieser Zehntel-Datensätze zu berechnen. Man erkennt, daß das Jackknife-subsampling Schätzer für  $\beta$  erzeugt, die miteinander kompatibel sind und auch in das Fehlerintervall des Schätzers für den gesamten Datensatz  $\beta_{all}$  passen. Die direkte Methode erzeugt dagegen Schätzer, die zwar fast exakt mit denen des Jackknife übereinstimmen, deren Fehler jedoch inkompatibel sind, und darüberhinaus verschwindet der Fehler des gesamten Datensatzes fälschlicherweise im numerischen Fehler.

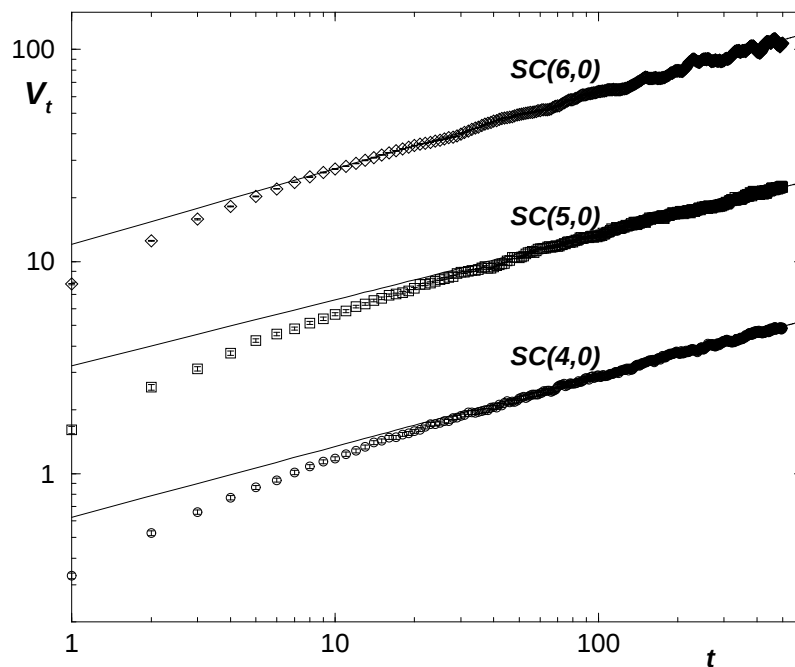
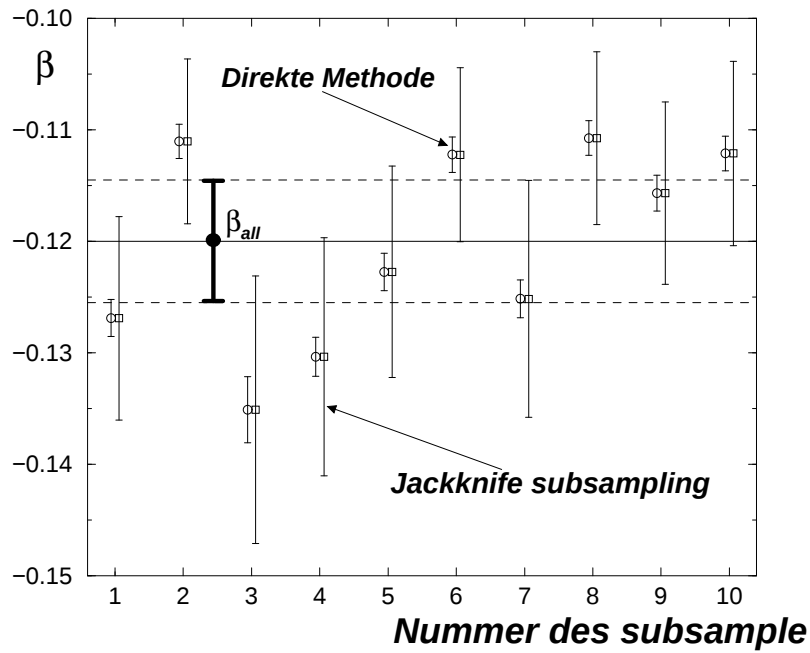


Abbildung 3.12:  $V_{1t}$  gegen  $t$  doppeltlogarithmisch für verschiedene Teppiche.

### 3.2.8 Zusammenfassung

Es wurde das kritische Verhalten des *Sierpiński*-Teppichs  $SC_{3,1}$  studiert. Um konsistente Ergebnisse zu erzielen, wurde FSS vermieden, und es wurde dargestellt, weshalb es auf fraktalen Gittern nicht anwendbar ist. Es wurden zwei verschiedene Methoden verwendet, um die kritischen Exponenten des Teppichs zu bestimmen, eine beruhend auf kritischem Verhalten im Gleichgewicht, eine beruhend auf dynamischem kritischem Verhalten. Trotz dieser völlig unterschiedlichen Ansätze wurden konsistente Ergebnisse für die Exponenten gewonnen (s. Tabelle 3.2 und 3.4). Auf Grund der Abweichung dieser Ergebnisse von denen des 2D-*Ising* ist gezeigt, daß die hier behandelten Fraktale über eine gebrochene Dimension auch *hinsichtlich ihres kritischen Verhaltens* besitzen.

Zum Abschluß sollen die Ergebnisse mit den Renormierungsgruppen-Berechnungen [145] verglichen werden. Für den hier betrachteten *Sierpiński*-Teppich ist  $d_H = 1.893$  und eine  $4 - \epsilon$  Renormierungsgruppen Rechnung ergibt  $\gamma \approx 1.85$  und  $\beta \approx 0.10$ . Das Ergebnis hier,  $\gamma \approx 2.05$  und  $\beta \approx 0.12$  würde demnach eher kompatibel mit  $d_H \approx 1.70$  sein. Obgleich möglicherweise bisher unbeachtete Korrekturen eine Rolle spielen könnten (der *Sierpiński*-Teppich 3-1 gilt als möglicherweise "untypisch" [130]), bedeutet diese Diskrepanz, daß die *Hausdorff*-Dimension der Fraktale offenbar nicht diejenige Dimension ist, die der  $4 - \epsilon$ -Entwicklung entspricht, obwohl sie zumindest einen Richtwert darstellt, also für die Exponenten eine Korrektur in die richtige Richtung produziert.



**Abbildung 3.13:** Vergleich der beiden Methoden, den Fehler der Schätzer der Exponenten aus dynamischem kritischem Verhalten zu berechnen. Die direkte Methode führt zu inkompatiblen Ergebnissen, während der Jackknife sinnvolle und kompatible Ergebnisse produziert.

### 3.3 Das $V_{2,2}$ -Stiefel-Modell auf fraktalen Gittern

Die bisher erarbeiteten Methoden ( $\chi/\chi'$  und *dynamic scaling*) und Ergebnisse (ein Fraktal ist fraktal im Sinne kritischen Verhaltens) sollen nun verwendet werden, um das kritische Verhalten eines Phasenübergangs der Form  $O(2)/O(0)$  zu erhellen. Dieser Abschnitt stellt mithin das Endergebnis dieser Arbeit dar. Es sollen nun die Ergebnisse der Simulationen des Stiefel-Modells, wie es in Abschnitt 1.5.3 vorgestellt wurde, diskutiert werden. Dazu wird zunächst der Stand der Forschung wiedergegeben und die Untersuchung des Stiefel-Modells auf dem Fraktal motiviert. In den darauffolgenden beiden Abschnitten werden die Ergebnisse für zwei verschiedene fraktale Gitter wiedergegeben. Abschließend folgt eine Zusammenfassung.

#### 3.3.1 Motivation und Stand der Forschung

Phasenübergänge in frustrierten Spin-Systemen mit Symmetriebrechung  $O(n)/O(n-2)$  sind seit langem aus Experimenten bekannt [146, 147] so etwa in helimagnetische Systeme wie Dysprosium, Holmium und Terbium [148] und sind immer noch Gegenstand der aktuellen Forschung, wie etwa antiferromagnetische hexagonale Perovskite wie  $\text{CsCuCl}_3$  [149, 150, 151, 152, 153, 154]. Bereits in den siebziger Jahren wurde mit den Mitteln der Renormierungsgruppe in erster Ordnung gezeigt, daß der Phasenübergang  $O(n)/O(n-2)$  mit  $n < 21.8 - 23.4\epsilon$  und  $\epsilon = 4 - d$  nicht durch einen stabilen Fixpunkt (stabil bezüglich aller anderen Felder als  $h$  und  $t$ ) kontrolliert wird [56, 155]. Die Abwesenheit eines stabilen Fixpunktes führt zu einer Divergenz des Flusses und daher zu einem Phasenübergang erster Ordnung (s. Abschnitt 1.4.2). Wie in Abb. 3.14 dargestellt gibt es im Phasendiagramm daher eine Linie, die einen Phasenübergang erster Ordnung für kleine  $n$  und große  $d$  von einem zweiten Ordnung trennt. Von diesem Phasenübergang zweiter Ordnung erwartet man eine neue Universalitätsklasse, die des **chiralen Fixpunktes**, d.h. einen neuen Satz kritischer Exponenten. Aus der oben genannten Ungleichung folgt sofort, daß experimentelle magnetische Systeme, d.h.  $d \leq 3$ , einen Phasenübergang zweiter Ordnung zeigen sollten. Seit den Achtzigern zeigten Experimente sowohl einen Phasenübergang zweiter Ordnung (s. [65]: [156, 157, 158, 159, 160, 161, 162, 163, 164, 165, 166]), als auch erster Ordnung [151]. Auch Simulationen [167, 168, 169, 170, 171, 172] favorisierten den Phasenübergang zweiter Ordnung und eine neue Universalitätsklasse, die auch durch neuere analytische Ergebnisse der Renormierungsgruppe bestätigt wurde [4]. Mitte der Neunziger entwickelten jedoch *Antonenko* und *Sokolov* in einer Drei-Schleifennäherung in zweiter Ordnung von  $\epsilon$  und fanden für  $n < 21.8 - 23.43\epsilon + 7.088\epsilon^2$ . Obwohl von ihnen für  $d = 3$  verschiedene kritische  $n_c$  gefunden werden, unterhalb derer man einen Phasenübergang erster Ordnung beobachten mußte, schließen alle Ergebnisse einen Phasenübergang zweiter Ordnung für  $n = 3$  oder gar  $n = 2$  aus [5, 173]. *Zumbach* entwickelte 1993 [6] das Konzept der **almost second order** oder der **quasi-zweiten-Ordnung**, bei dem der Renormierungsfluß, wie er in Abschnitt 1.4.2 vorgestellt wurde, verursacht durch einen komplexen Fixpunkt ein Minimum zeigt: Die Idee ist, daß der Renormierungsfluß in der Umgebung eines komplexen Fixpunkt zu kriechen beginnt, genauso als würde er auf einen echten Fixpunkt zufließen. Erst nach einer großen Zahl von Renormierungen hat er dann das Minimum passiert und divergiert, die erste Ordnung wird sichtbar. Ergänzt wird dieses Konzept durch eine Korrektur der Skalengesetze, die für die kritischen Exponenten eines komplexen Fixpunktes gelten, der ein Verhalten quasi-zweiter-Ordnung induziert. Man erhält auf diese Weise das Kriterium  $\eta < 0$  für einen Phasenübergang quasi-zweiter-Ordnung,  $\eta$  darf für Phasenübergänge zweiter Ordnung ansonsten nicht negativ werden [174].

Ein Phasenübergang dieses Typs ist nicht universell, denn es hängt von der nicht-

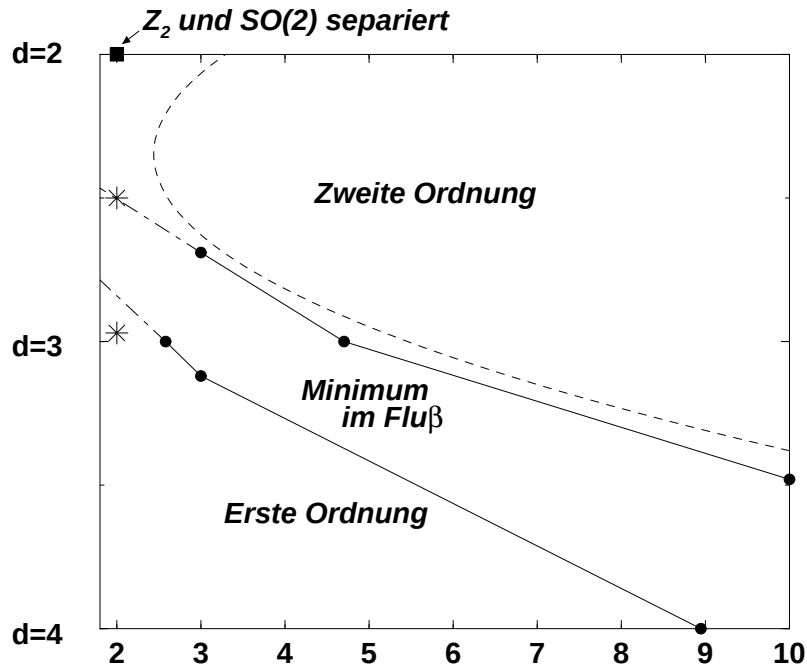
universellen initialen Lage auf der kritischen Oberfläche relativ zum *basin of attraction* ab, ob das Einflußgebiet des komplexen Fixpunktes erreicht wird, oder ob die Renormierung davon wegführt (s. Abb. 3.15). Dieses Konzept erklärt, warum verschiedene Modelle mit gleichen Dimensionen, Symmetrien und Symmetriebrechung dennoch verschiedene Resultate liefern. Während etwa der Heisenberg-STA ( $O(3) \rightarrow O(1)$ , s. Abschnitt 1.5.4) einen Phasenübergang quasi-zweiter-Ordnung zeigt, also mit  $\eta < 0$ , zeigt das „direct trihedral model“ [175, 176, 177, 178] einen deutlichen Phasenübergang erster Ordnung.

Die Ergebnisse im Phasendiagramm 3.14 stammen von *Zumbach* für das Stiefel-Modell [179]. Andere Ansätze, insbesondere solche für  $2 + \epsilon$  ( $NL\sigma$  model [7, 180]), sollen hier nicht weiter betrachtet werden, da sie letztlich nur zu einer feineren Unterscheidung der Phasenübergänge innerhalb des Gebietes zweiter Ordnung führen. Die in Abb. 3.14 eingezeichneten Linien ergeben sich, indem man die explizit berechneten Punkte miteinander verbindet, gestrichelt sind Extrapolationen eingetragen. Das Gebiet des Phasenübergang erster Ordnung findet sich für große  $d$  und kleine  $n$ , es folgt ein Streifen der *Zumbach*’schen Phasenübergänge quasi-zweiter-Ordnung und für große  $n$  und kleine  $d$  dann das Gebiet der Phasenübergänge echt zweiter Ordnung. Zum Vergleich ist das ursprüngliche Ergebnis von *Antonenko* und *Sokolov* in zweiter Ordnung von  $\epsilon$  als gestrichelte Linie eingetragen. Für  $n = 2$  findet man in diesem Diagramm mit ganzzahligen Raumdimensionen keinen Phasenübergang zweiter Ordnung, da bei  $d = 2$  der ursprüngliche Übergang  $O(2) \rightarrow O(0)$  in  $Z_2$  und  $SO(2)$  zerfällt [66] und bei  $d = 3$  bereits ein Phasenübergang erster Ordnung beobachtet wird. Daher bleibt hier nur eine gebrochene Raumdimension, wenn man das Verhalten der zweiten Ordnung prüfen möchte. Bei  $n = 2$  sollte man auch in der unmittelbaren Umgebung von  $d = 3$  einen Phasenübergang erster Ordnung finden. Um sicherzustellen, daß fraktale Gitter nicht unbekannte zusätzliche Korrekturen hinzufügen, wird das erste Gitter, das hier untersucht werden soll, daher *Hausdorff*-Dimension  $d_{\mathcal{H}} \approx 2.97$  haben. Das zweite zu untersuchende Gitter liegt mit  $d_{\mathcal{H}} = 2.5$  deutlich jenseits des Gebietes erster Ordnung, wobei die Nähe zum Einzugsgebiet des komplexen Fixpunktes unerheblich ist, da ja hier das Verhalten einer Quasi-zweiten-Ordnung erwartet wird, es ist also in jedem Fall ein kontinuierlicher Phasenübergang zu erwarten. Beide Systeme sind in Abb. 3.14 durch Sterne gekennzeichnet.

### 3.3.2 Algorithmen und simulierte Größen

Für die Simulationen kommen alle lokalen Algorithmen in Frage, also *Heatbath* und *Metropolis*. Darüberhinaus läßt sich auch der *Wolff*-Algorithmus so erweitern, daß er auch auf das Stiefel-Modell anwendbar ist. Soweit die Literatur gesichtet wurde, ist diese Modifikation eines Cluster-Algorithmus auf einen Fall eines Übergangs  $O(n)/O(n-2)$  bisher nicht gemacht worden. Dennoch liegt sie auf der Hand: Wie bereits in Abschnitt (2.2.2) dargestellt, reicht es, eine Operation  $R$  anzugeben, mit deren Hilfe jede lokale Konfiguration in jede andere überführt werden kann und die gleichzeitig  $R^2 = 1$  erfüllt. Da die lokalen Konfigurationen als Tupel bestehend aus Chiralität  $\sigma$  und Spin-Orientierung  $\mathbf{s}_i$  gegeben sind, läßt sich  $R$  zusammensetzen aus Identitätsoperation oder Spiegelung von  $\sigma$  (zufällig gewählt) und Spiegelung von  $\mathbf{s}_i$  mit zufälliger Lage der Spiegelebene.

Die lokalen Algorithmen lassen sich deutlich beschleunigen, d.h. in der Korrelationszeit absenken, indem man *Overrelaxation* [181] anwendet. Diese Operation auf der Gitterkonfiguration ändert nicht die innere Energie, jedoch die Magnetisierung. *Overrelaxation* sorgt daher für eine Bewegung auf den Äquipotentialflächen (bzw. -Punktmengen) im Phasenraum.



**Abbildung 3.14:** Zumbachs Ergebnisse für den Phasenübergang des Stiefel-Modells. Für das zu untersuchende Modell mit  $d_{\mathcal{H}} \approx 2.97$  (gekennzeichnet durch einen Stern) ist ein Phasenübergang erster Ordnung zu erwarten, für das zweite (ebenfalls gekennzeichnet durch einen Stern) bei  $d_{\mathcal{H}} = 2.5$  ein kontinuierlicher Phasenübergang. Gestrichelt ist das Ergebnis von Antonenko und Sokolov in zweiter Ordnung von  $\epsilon$  eingetragen, das ursprünglich erste und zweite Ordnung trennte.

Im Stiefel-Modell mit dem Hamiltonian (1.116) ist bei  $\mathbf{H}_s = \mathbf{0}$  und  $H_\sigma = 0$

$$\mathcal{H}_{\text{Stiefel}} = -J \sum_{i.nn.j} (1 + \sigma_i \sigma_j) \mathbf{s}_i \mathbf{s}_j \quad . \quad (3.56)$$

Diesen Hamiltonian kann man jetzt bezüglich eines Gitterplatzes  $a$  zerlegen:

$$\mathcal{H}_{\text{Stiefel}} = -J \sum_{\substack{i.nn.j \\ i,j \neq a}} (1 + \sigma_i \sigma_j) \mathbf{s}_i \mathbf{s}_j - J s_a \sum_{i.nn.a} (1 + \sigma_i \sigma_a) \mathbf{s}_i \quad . \quad (3.57)$$

Betrachtet man nun  $\mathbf{m}_a = \sum_{i.nn.a} (1 + \sigma_i \sigma_a) \mathbf{s}_i$  als lokales Feld, so kann  $\mathbf{s}_a$  um diese Feldrichtung rotieren, ohne  $\mathcal{H}_{\text{Stiefel}}$  zu verändern. Da es sich im Falle des  $V_{2,2}$ -Stiefels bei den  $\mathbf{s}_i$  um zweikomponentige Vektoren handelt, lassen sie sich an den  $\mathbf{m}_a$  spiegeln und man erhält<sup>4</sup>

$$\mathbf{s}'_a = \mathbf{s}_a + 2 \begin{pmatrix} m_{ay} \frac{m_{ax} s_{ay} - m_{ay} s_{ax}}{|\mathbf{m}_a|^2} \\ m_{ax} \frac{m_{ay} s_{ax} - m_{ax} s_{ay}}{|\mathbf{m}_a|^2} \end{pmatrix} \quad . \quad (3.58)$$

Da *Overrelaxation* die Energie nicht verändert, betrifft sie insbesondere nicht die *detailed balance*. Auch die *accessibility assumption* ist nicht von dieser Operation berührt. Die

<sup>4</sup>Die Rechnung wird besonders hinsichtlich der Numerik wesentlich eleganter und je nach Hardware auch schneller, wenn man die Spiegelung eines zweidimensionalen Vektors ins Komplexe verlagert. Wenn der Vektor dort den Winkel  $\varphi_s$  und die Richtung, an der gespiegelt werden soll, den Winkel  $\varphi_m$  hat, dann ist der neue Winkel  $\varphi'_s = 2\varphi_m - \varphi_s$ . Mit komplexen Zahlen also  $s' = m^2 s^* / (m m^*)$ .



| Algorithmus                          | $\tau_M$ | $\tau_E$ | CPU-Zeit/ $\mu s$ | $\tau_r/ms$ |
|--------------------------------------|----------|----------|-------------------|-------------|
| <i>Metropolis</i>                    | 2410     | 1729     | 1.55              | 3.74        |
| <i>Heatbath</i>                      | 444      | 381      | 3.09              | 1.18        |
| <i>Metropolis</i> + Over (rnd)       | 1500     | 1248     | 1.79              | 2.69        |
| <i>Heatbath</i> + Over (rnd)         | 369      | 310      | 3.25              | 1.20        |
| <i>Metropolis</i> + Over (det)       | 1109     | 911      | 1.71              | 1.90        |
| <i>Heatbath</i> + Over (det)         | 279      | 262      | 3.32              | 0.93        |
| <i>Metropolis</i> + Over (det) + dis | 866      | 735      | 1.75              | 1.51        |
| <i>Heatbath</i> + Over (det) + dis   | 363      | 310      | 3.18              | 0.98        |
| <i>Wolff</i>                         | 1271     | 1099     | 0.90              | 1.14        |
| <i>Wolff</i> + Over (det) + dis      | 1083     | 944      | 1.21              | 1.30        |

**Tabelle 3.5:** Die Korrelationszeiten verschiedener Algorithmen für ein  $15 \times 15 \times 15$  einfach kubisches Gitter mit Stiefel-Spins in Kombination mit der *Overrelaxation* (in Tabelle durch *Over* gekennzeichnet). Die Angaben  $\tau_M$  und  $\tau_E$  sind in sweeps, die Angabe  $\tau_r$ , angegeben in  $ms$ , die maximale Korrelationszeit multipliziert mit der CPU-Zeit in  $\mu s$ . Die CPU-Zeit ist normiert auf einen *sweep* und einen Spin. Mit *rnd* ist die zufällige *Overrelaxation* bezeichnet, mit *det* die erzwungene. Mit *dis* sind Anwendungen gekennzeichnet, bei denen disjunkte Untergitter jeweils für sich der *Overrelaxation* unterzogen werden. Eine zufällige Reihenfolge ist ebenfalls möglich, aber teurer und hier nicht dargestellt. Der *Wolff*-Algorithmus schneidet überraschend schlecht ab, trotzdem er mit einer mittleren Clustergröße von 1070 in jedem *sweep* etwa ein Drittel aller Spins zusammenfaßt. Da die Werte lediglich der Orientierung dienen, welcher Algorithmus zu verwenden ist, erübrigen sich Angaben zum Fehler.

verwendet:

$$\mathbf{M}_{XY} = \frac{1}{N} \sum_i \mathbf{s}_i \quad (3.59)$$

$$M_\kappa = \frac{1}{N} \sum_i \sigma_i \quad (3.60)$$

mit  $N$  der Zahl der Spins. Der Vollständigkeit halber sei hier eine Auflistung aller hier verwendeten Größen:

$$E = \langle \mathcal{H}_{\text{Stiefel}} \rangle \quad (3.61)$$

$$\chi_{XY} = \left. \frac{\partial M}{\partial H} \right|_T = \frac{\langle \mathbf{M}_{XY}^2 \rangle - \langle \mathbf{M}_{XY} \rangle^2}{T} \quad (3.62)$$

$$\chi_\kappa = \left. \frac{\partial M}{\partial H} \right|_T = \frac{\langle \mathbf{M}_\kappa^2 \rangle - \langle \mathbf{M}_\kappa \rangle^2}{T} \quad (3.63)$$

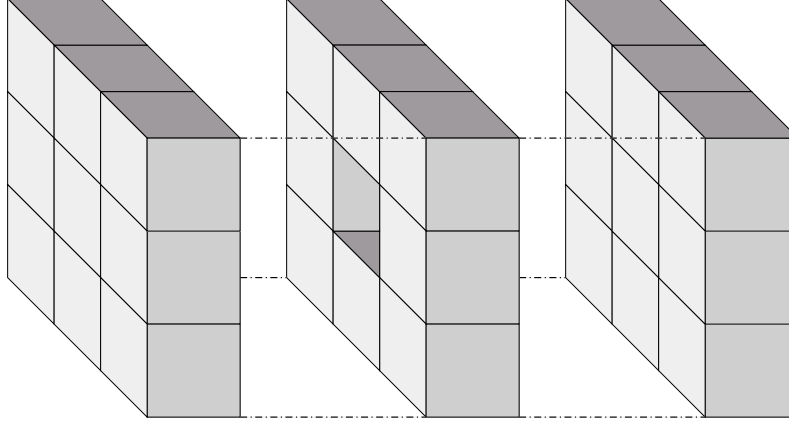
$$c_H = \frac{\langle E^2 \rangle - \langle E \rangle^2}{T^2} \quad (3.64)$$

$$B = 1 - \frac{\langle E^4 \rangle}{3\langle E^2 \rangle^2} \quad (3.65)$$

### 3.3.3 Ergebnisse bei $d_{\mathcal{H}} = 2.9656 \dots$

Bei dem in diesem Abschnitt untersuchten Gitter handelt es sich um die dreidimensionale Verallgemeinerung des *Sierpiński*-Teppichs  $3-1$  auf drei Dimensionen,  $SC_{31}^{3D}(k, i)$ , wiederum mit Nächster-Nachbar-Wechselwirkung, bei den in jeden Substituenten ein Stiefel-Spin plaziert wird. Auch wenn hier im folgenden nicht expandiert werden wird, soll die genannte

Notation beibehalten werden. Wie in Abb. 3.16 dargestellt, erhält man den Generator des  $SC_{31}^{3D}$ , indem der mittlere Würfel aus einer Konstruktion bestehend aus  $3 \times 3 \times 3$  Würfeln entfernt wird. Initiator und Substituent sind jeweils ein Würfel. Die *Hausdorff*-Dimension ergibt sich zu  $d_{\mathcal{H}} = \ln(26)/\ln(3) = 2.9656 \dots$ .



**Abbildung 3.16:** „Explosionszeichnung“ des Generators des dreidimensionalen *Sierpiński*-Teppichs 3 – 1. Von  $3 \times 3 \times 3$  Würfeln wird der zentrale entfernt.

### Identifikation eines Phasenübergang erster Ordnung

Für dieses Gitter wird ein Phasenübergang erster Ordnung erwartet, wie er für  $d_{\mathcal{H}} = 3$  im Stiefel-Modell bereits gefunden wurde [65]. Ein Phasenübergang erster Ordnung lässt sich durch folgende Kriterien identifizieren [182, 183, 184, 185]:

- Das Histogramm  $P(E)$  mit  $E$  der inneren Energie hat einen Doppelpeak am Übergang.
- Das Maximum der spezifischen Wärme  $c_{H_{max}}$  und der Suszeptibilität  $\chi_{max}$  sind proportional zum Volumen  $V$  (FSS), während in einem Phasenübergang zweiter Ordnung die Maxima schwächer als  $V$  divergieren.
- Das Minimum von

$$B = 1 - \frac{\langle E^4 \rangle}{3\langle E^2 \rangle^2} \quad (3.66)$$

geht wie

$$B = B^* + B^{(2)}V^{-1} + \mathcal{O}(V^{-2}) \quad (3.67)$$

mit  $B^* \neq 2/3$  [182] (FSS), während es im Falle eines Phasenübergang zweiter Ordnung mit  $L \rightarrow \infty$  gegen  $2/3$  strebt.

- Die Temperatur, an der die spezifische Wärme  $c_V$  bzw. die Suszeptibilität  $\chi$  ein Maximum haben, geht wie  $T_{max} = T_0 + aV^{-1} + \mathcal{O}(V^{-2})$  [182] (FSS)

Kriterien, die auf Überlegungen zum FSS beruhen, sind - wie bereits oben festgestellt - auf fraktalen Gittern höchstens von qualitativer Natur. Wird dennoch FSS verwendet, so findet man wegen  $c_{H_{max}} \propto L^{\alpha/\nu}$  mit  $\alpha/\nu = d$  und  $\nu d = 2 - \alpha$  aus dem *Josephson-law* (1.42)  $\alpha = 1$  und  $\nu = 1/d$ . Mit  $\gamma/\nu = d$  findet man wegen (1.42) und *Rushbrooke* (1.40)  $\gamma = 1$  und  $\beta = 0$ . Mit *Widom* (1.41) divergiert dann  $\delta$  und mit *Fisher* (1.43) wird  $\eta = 2 - d$ . Diese Exponenten würde man finden, wenn man versuchen würde, FSS zur Berechnung kritischer Exponenten auf einen Phasenübergang erster Ordnung anzuwenden. Diese Exponenten sich bei einem Übergang schwach erster Ordnung zu erwarten [183].

Daß ein Histogramm  $P(E)$  einen Doppelpick am Übergang hat, ist unmittelbar einleuchtend: Wegen  $U = F - T \frac{\partial F}{\partial T} \Big|_H$  muß die innere Energie am Phasenübergang erster Ordnung per definitionem springen oder divergieren, und daher bildet sich in endlichen Systemen für die Energie links und rechts vom Übergang je ein Wahrscheinlichkeitspeak aus (eine Divergenz der inneren Energie bei endlichen Temperaturen wäre unphysikalisch).

Im konkreten Fall war eine FSS-Analyse kaum möglich. Im zweiten Iterationsschritt hat das  $SC_{31}^{3D}(2, 0)$  ein Größe von  $26^2$  Spins und ist damit sehr klein. Der nächste Schritt hat mit  $26^3$  Spins bereits eine brauchbare Größe, zum Vergleich: Ein 2D-*Ising* hätte mit  $L = 132$  etwa ebensoviele Spins. Jedoch ist die Zahl der nächsten Nachbarn in dem Fraktal wesentlich höher, man findet in derselben Notation wie in (3.20)  $\bar{n}_{2i} = 5.6894$  und  $\bar{n}_{3i} = 5.6617$ . Das nächst größere Gitter  $SC_{31}^{3D}(4, 0)$  ist bereits an der Grenze dessen, was mit den zur Verfügung stehenden Ressourcen zu simulieren ist (2D-*Ising* hätte  $L = 676$ ), ein  $SC_{31}^{3D}(5, 0)$  kommt gar nicht mehr in Frage.

### Ergebnisse der Simulation

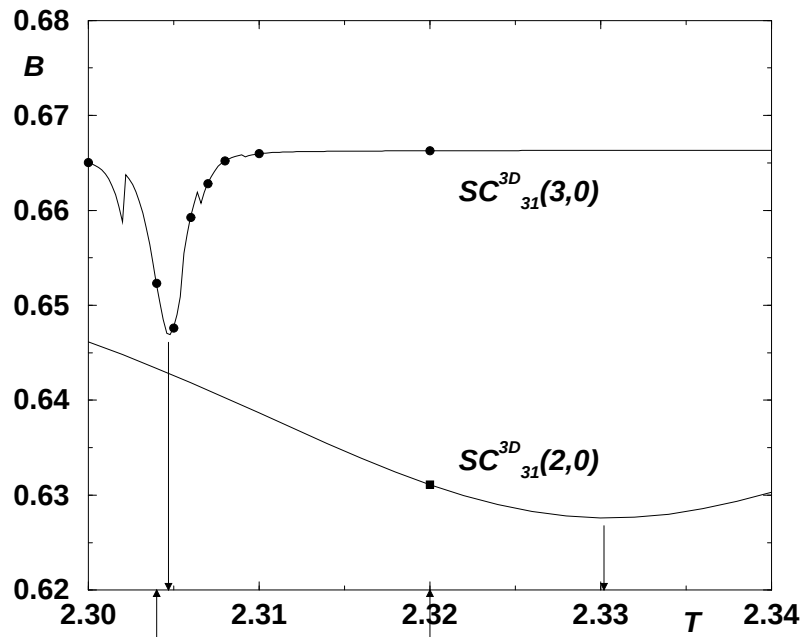
Um den Phasenübergang erster Ordnung identifizieren zu können, mußte zunächst die Übergangstemperatur gefunden werden. Dazu bieten sich die *Peaks* in  $\chi$  und  $c_H$  sowie das Minimum von  $B$  (3.66) an. Gerade diese Größe ist besonders interessant, da zur Unterscheidung zwischen erster und zweiter Ordnung nicht unterschiedliche starke Divergenzen herangezogen werden müssen, sondern lediglich  $B^* \neq 2/3$  zur Disposition steht. Alle Ergebnisse wurden mit  $10^5$  bis  $2 \cdot 10^5$  MC-Schritten zum Equilibrieren und  $10^6$  MC-Schritten für die Statistik gewonnen.

In Abb. 3.17 ist der Verlauf  $B(T)$  eingezeichnet. Die Interpolationen wurden mit Hilfe der Histogramm-Methode angefertigt (s. Abschnitt 2.4), auch wenn a priori klar ist, daß diese Methode bei einem Phasenübergang erster Ordnung, der typischerweise unter dem Auftreten metastabiler Zustände leidet, versagen muß, weil es nur mit sehr großer Statistik möglich ist, das Histogramm über die Phasengrenze hinweg ausreichend fein aufzulösen. Die Verteilung wird darüberhinaus typischerweise sehr breit. Die daraus resultierenden Artefakte sind ebenfalls in Abb. 3.17 zu sehen. Dennoch kann die Histogramm-Methode einen Anhaltspunkt liefern, wo nach dem Übergang zu suchen ist.

In Abb. 3.17 ist die vermutete Quasi-Übergangstemperatur  $T_0 \approx 2.304$  für das Gitter  $SC_{31}^{3D}(3, 0)$  bereits gut zu erkennen. Für diese Temperatur ist das Histogramm in Abb. 3.18 zusammen mit dem Histogramm von  $SC_{31}^{3D}(2, 0)$  bei  $T = 2.32$  gezeigt, das trotz seiner geringen Größe bereits eine Einschnürung zeigt. Da die erste Ordnung überdeutlich zu erkennen ist, wurde auf weitere Simulationen verzichtet.

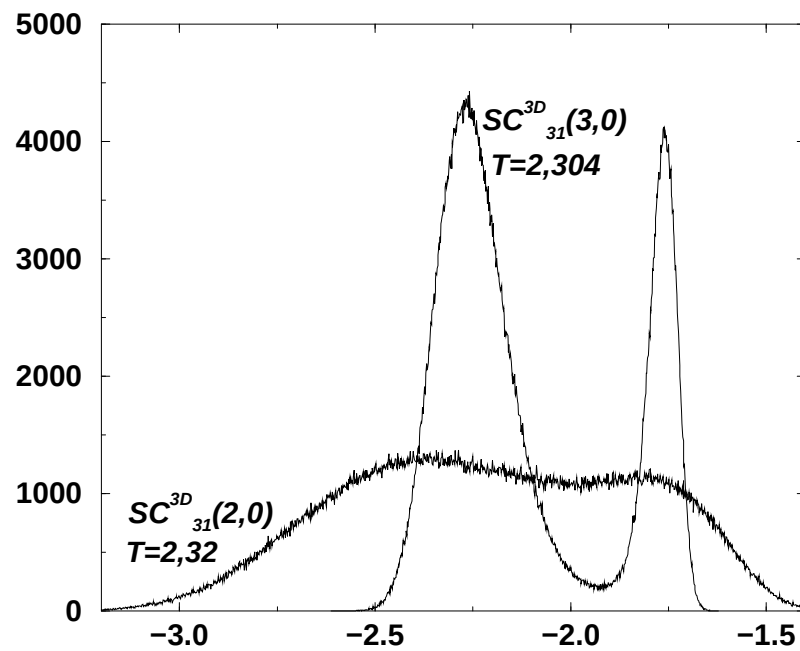
### Zusammenfassung

Wie erwartet zeigt das  $V_{2,2}$ -Stiefel-Modell auch auf den fraktalen Gittern  $SC_{31}^{3D}(2, 0)$  und  $SC_{31}^{3D}(3, 0)$  einen Phasenübergang erster Ordnung. An diesem Punkt ist das Phasendia-



**Abbildung 3.17:** Zur Feststellung der Übergangstemperatur dient das Minimum der Größe  $B$  (3.66). Auch wenn die Histogramm-Methode zu deutlichen Artefakten führt, da nicht genügend Statistik verfügbar ist, gibt sie doch einen Anhaltspunkt, wo nach dem Übergang zu suchen ist. Die Pfeile von oben markieren die Minima von  $B$ , die Pfeile von unten die Stellen an denen die Simulation durchgeführt wurde, die in Abb. 3.18 zu sehen ist.

gramm reffig:frustdiagramm also bestätigt. Eine weiterführende Untersuchung, insbesondere die Feststellung der Übergangstemperatur erübrigt sich auf Grund der Eindeutigkeit der Ergebnisse und der Fragwürdigkeit des für eine eingehendere Analyse benötigten FSS.



**Abbildung 3.18:**  $P(E)$ -Histogramme für die beiden Gitter  $SC_{31}^{3D}(2,0)$  und  $SC_{31}^{3D}(3,0)$ . Die Energie ist auf einen Spin normiert. Die erste Ordnung ist deutlich zu erkennen.

### 3.3.4 Ergebnisse bei $d_{\mathcal{H}} = 2.5 \dots$

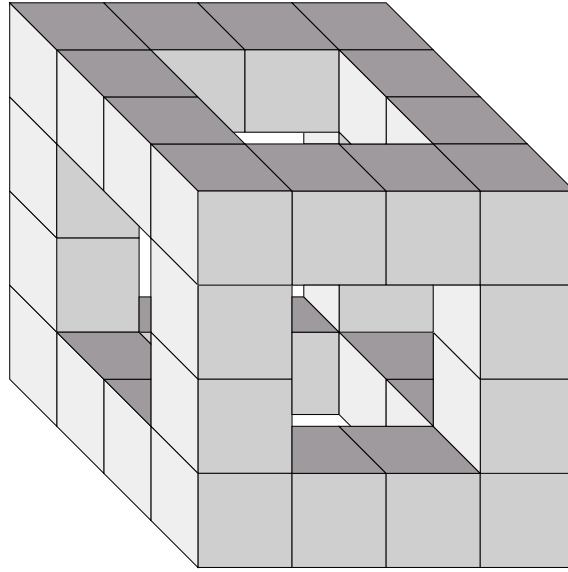
Das zweite untersuchte Gitter, von dem ein Phasenübergang zweiter Ordnung erwartet wird, ist ein **Menger-Schwamm**  $ME_{42}^{3D}(k, i)$  [127]. Der Unterschied zwischen Menger-Schwämmen und *Sierpiński*-Teppichen besteht im Generator. Den des  $d$ -dimensionalen *Sierpiński*-Teppichs kann durch

$$G(x_1, x_2, \dots, x_d) = \begin{cases} 0 & \text{falls } \sum_i^d g(x_i) = 0 \\ 1 & \text{ansonsten} \end{cases}, \quad (3.68)$$

darstellen, wobei  $g(x)$  ein Vektor mit  $l$  Komponenten und  $\sum_i^l g(i) = l - q$ . Dann bedeutet eine 1 im Generator, daß dort ein Substituent liegt, eine 0 bedeutet ein Loch. Für die oben diskutierten *Sierpiński*-Teppiche ist  $\mathbf{g} = (1, 0, 1)$  mit  $g(i) = g_i$ . In der gleichen Notation sieht der Generator des *Menger*-Schwamm für drei Dimensionen so aus:

$$G(x_1, x_2, x_3) = \begin{cases} 0 & \text{falls } \sum_i^d g(x_i) \leq 1 \\ 1 & \text{ansonsten} \end{cases}. \quad (3.69)$$

Der *Menger*-Schwamm hat demnach mehr Löcher. Der Generator entsteht, indem man von  $l^3$  Würfeln  $q^3$  im Zentrum entfernt und  $6 \times q^2$  auf den Seiten. Der hier verwendete Schwamm mit  $l = 4$  und  $q = 2$  ist in Abb. 3.19 dargestellt. Der Generator besteht



**Abbildung 3.19:** Der Generator des *Menger*-Schwamms  $4 - 2$  entsteht, indem man den eines dreidimensionalen *Sierpiński*-Teppichs  $4 - 2$  auch an den Rändern durchstößt.

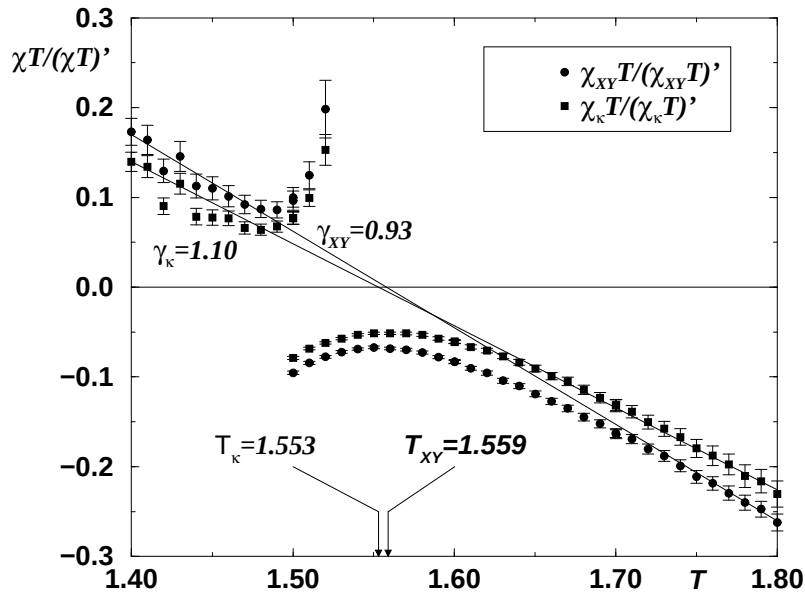
aus  $4^3 - 2^3 - 6 \times 2^2 = 32$  Substituenten. In der zweiten Iteration besteht er daher aus  $32 \times 32$  Spins bei  $\bar{n}_{2i} = 3.9375$ , daß bereits unter dem des Quadratgitters liegt. Der nächste Iterationsschritt erzeugt mit  $32^3 \approx 181^2$  (diese Angabe zum Vergleich mit 2D-*Ising*) ein Gitter brauchbarer Größe, wobei  $\bar{n}_{3i} = 3.72656$ . Ein Gitter eines weiteren Iterationsschritts zu simulieren, ist mit  $32^4 = 1024^2$  nicht mehr sinnvoll möglich. Im folgenden also einige

vage Schätzungen auf der Basis des  $ME_{42}^{3D}(2,0)$  und verlässlichere Ergebnisse auf Basis des  $ME_{42}^{3D}(3,0)$ .

### $P(E)$ am Übergang

Für  $ME_{42}^{3D}$  muß nun zunächst geprüft werden, ob möglicherweise doch ein klarer Doppelpeak am Übergang auftritt. Dazu muß zunächst die Übergangstemperatur  $T_{trans}$  gefunden werden, von der vorerst nicht bekannt ist, ob sie nicht möglicherweise die kritische Temperatur  $T_c$  eines Phasenübergangs zweiter Ordnung ist. Die Abwesenheit eines Doppelpeaks bedeutet im Umkehrschluß jedoch nicht automatisch, daß kein Phasenübergang erster Ordnung vorliegt. Liegen die *Peaks* nur genügend dicht beieinander, ist es möglich, daß die erste Ordnung in  $P(E)$  nicht sichtbar ist.

Es stellte sich als außerordentlich schwierig heraus, die Übergangstemperatur genau zu bestimmen. Einen ersten Anhaltspunkt gibt die  $\chi/\chi'$ -Methode für die Daten der Chiralität und der XY-Magnetisierung des  $ME_{42}^{3D}(2,0)$ . Diese Analyse ist jedoch mit Vorsicht zu behandeln, da das Gitter sehr klein ist. Eine seriöse Analyse ist mit diesem System gar nicht möglich. Das Ergebnis ist in Abb. 3.20 zu sehen und soll nur einen ungefähren Eindruck vermitteln (wiederum mit  $10^5$  Schritten zum Equilibrieren und  $10^6$  für die Statistik, wiederum mit *Heatbath* und disjunkter, deterministischer Overrelaxation). Mit der in Abschnitt 3.1 vorgestellten Methode ergibt sich ein  $T_{trans} \approx 1.55$  und  $\gamma$  in der Nähe von 1. Man kann  $T_{trans}$  auch über die mittlere Zahl nächster Nachbarn abschätzen und erhält  $T_{trans \text{ ME}} \approx T_{trans \text{ SC}} \bar{n}_{trans \text{ ME}} / \bar{n}_{trans \text{ SC}} \approx 1.51$ . Es mag an dieser Stelle wichtig



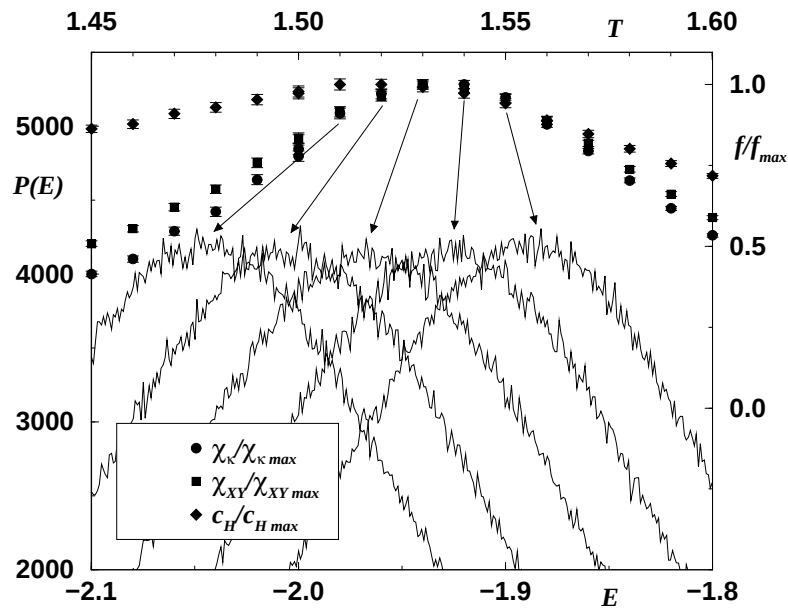
**Abbildung 3.20:**  $\chi_{XY}T/(\chi_{XY}T)'$  und  $\chi_{\kappa}T/(\chi_{\kappa}T)'$  für den *Menger*-Schwamm  $ME_{42}^{3D}(2,0)$ . Dieses (zu kleine) System liefert  $T_{trans} \approx 1.55$  und  $\gamma \approx 1$ .

sein zu betonen, daß auch ein Phasenübergang schwach erster Ordnung ein Bild wie 3.20 produzieren könnte.

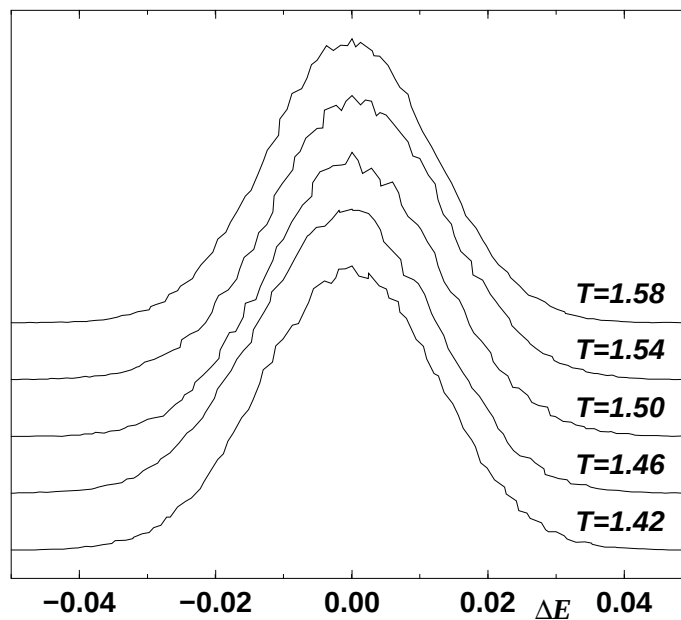
Um die Histogramme auf einen Doppelpeak hin zu überprüfen, sind sie in Abb. 3.21 zusammen mit den Verläufen der Größen  $c_H$ ,  $\chi_{XY}$  und  $\chi_{\kappa}$  für den *Menger*-Schwamm  $ME_{42}^{3D}(2,0)$  dargestellt.

Für den nächst größeren Schwamm verhindert die immense Korrelationszeit von bei-

spielsweise  $\tau_M = 447$  bei  $T = 1.4$  eine eingehendere Analyse mit den Mitteln der statischen kritischen Phänomene. Mit dieser Korrelationszeit reduziert sich die Zahl effektiv unabhängiger Samples auf 221 bei  $2 \cdot 10^5$  sweeps. Diese  $2 \cdot 10^5$  sind jedoch die Grenze dessen, was an Rechenzeit investiert werden sollte bei einer breit angelegten Suche nach der kritischen Temperatur. Mit der Darstellung der Histogramm-Spitzen für  $T = 1.42$  bis  $T = 1.58$  in Abb. 3.22 soll die Analyse statischer Daten an dieser Stelle daher beendet sein.



**Abbildung 3.21:** Die Histogramme des *Menger*-Schwamms  $ME_{42}^{3D}(2, 0)$  in der Umgebung der Maxima von  $\chi_\kappa$ ,  $\chi_{XY}$  und  $c_H$  zeigen keinen Doppelpeak.



**Abbildung 3.22:** Die Spitzen der Histogramme des *Menger*-Schwamm  $ME_{42}^{3D}(3, 0)$  im mutmaßlichen Bereich des Übergangs zeigen keinen Doppelpeak. Aufgetragen ist auf der Abszisse die Energiedifferenz um das Maximum des normierten Energie-Histogramms.

### Die *Binder*-Kummulante im *dynamic scaling*

Obwohl die Motivation aller bisher vorgestellten Verfahren war, die Information, die man aus einer Simulation entnehmen kann, zu maximieren, reichen die Methoden offenbar nicht aus, um die kritischen Exponenten des *Menger*-Schwamms  $ME_{42}^{3D}(3, 0)$  zu bestimmen. Die im folgenden vorgestellte Methode<sup>5</sup> stellt derzeit den einzigen Zugang zu dem Problem dar, es bedarf jedoch noch intensiverer Studien, um die Methode zu festigen.

Der von *Zheng* [117] vorgeschlagene Ansatz für das Verhalten der Magnetisierung bei *dynamic scaling* (2.98) wird dabei wieder aufgegriffen, und aus dem Ansatz für den singulären Teil der freien Energie (2.99) wird

$$f((T - T_c), h, t, m_0) = b^{-d} f((T - T_c) b^{y_t}, h b^{y_h}, t/b^z, t^{x_0} m_0) \quad , \quad (3.70)$$

wobei  $m_0$  die initiale Magnetisierung bezeichnet. Wählt man als Anfangszustand den Grundzustand des Systems, also  $m_0 = 1$ , so befindet sich das System bereits an einem Fixpunkt der Magnetisierung, so die Argumentation von *Zheng*. Damit wird (3.70)

$$f((T - T_c), h, t, 1) = b^{-d} f((T - T_c) b^{y_t}, h b^{y_h}, t/b^z, 1) \quad . \quad (3.71)$$

Für den Fall eines ideal ungeordneten Zustandes  $T \rightarrow \infty$  ist hingegen auch ganz formell

$$f((T - T_c), h, t, 0) = b^{-d} f((T - T_c) b^{y_t}, h b^{y_h}, t/b^z, 0) \quad . \quad (3.72)$$

Durch zweimaliges Ableiten nach dem äußeren Feld findet man ausgehend von einem ungeordneten Zustand die zeitabhängige Suszeptibilität,  $\chi_t^0$ , bzw. ausgehend von einem vollkommen geordneten Zustand  $T = 0$ ,  $\chi_t^1$ . Der Quotient dieser beiden Größen

$$U_t^X = \frac{\chi_t^0}{\chi_t^1} \quad (3.73)$$

läßt sich mit  $b = t^{(1/z)}$  und bei  $h = 0$  schreiben als

$$U_t^X(t, T) = \frac{f''((T - T_c) t^{\frac{1}{\nu z}}, 0, 1, 0)}{f''((T - T_c) t^{\frac{1}{\nu z}}, 0, 1, 1)} \quad , \quad (3.74)$$

wobei  $f''$  die zweifache Ableitung von  $f$  nach  $h$  bedeutet und  $y_t = 1/\nu$  verwendet wurde. Nimmt man nun an, diese Funktion ließe sich in der Nähe des kritischen Punktes entwickeln, findet man [39]

$$U_t^X(t, T) = U^* + a_U(T - T_c)t^{1/(\nu z)} + c_U t^{-\omega_t} \quad (3.75)$$

völlig analog zu (2.82) mit der Ersetzung  $L^{1/\nu} \rightarrow t^{1/(\nu z)}$ . In einer genaueren Behandlung würde die correction *to scaling*  $c_U t^{-\omega_t}$  von vornherein in den Argumenten der Freien Energiedichte auftreten, worauf hier jedoch verzichtet wurde.

Diese *Binder*-Kummulante für das *dynamic scaling* soll nun analog zu der hochempfindlichen Methode im FSS dazu verwendet werden, die kritische Temperatur des *Menger*-Schwamms  $ME_{42}^{3D}(3, 0)$  zu bestimmen. Sobald diese bekannt ist, kann das *dynamic scaling* an dieser Stelle dazu verwendet werden, die kritischen Exponenten zu bestimmen.

Ebenfalls völlig analog zum FSS (s. Abschnitt 2.4) wird nun  $U_t^X(t, T)$  statt für verschiedene Systemgrößen  $L$  für verschiedene Zeiten  $t$  in Abhängigkeit von der Temperatur  $T$

---

<sup>5</sup>Der Vorschlag und die genauere Analyse zu dieser Methode stammen von *D. Loison*. Im Lichte dieses Ansatzes gewinnt die Anwendung der Histogramm-Methode auf das *dynamic scaling* (s. Abschnitt C), das im Rahmen dieser Arbeit entwickelt wurde, besondere Bedeutung.

aufgetragen. Während der Schwamm  $ME_{42}^{3D}(2, 0)$  keine sinnvollen Ergebnisse liefert (unabhängig von der Temperatur ist  $U_{XYt}^x(t, T)$  praktisch konstant in  $t$ , was auf die geringe Systemgröße zurückzuführen ist), sind die Ergebnisse für den Schwamm  $ME_{42}^{3D}(3, 0)$  durchaus brauchbar. In Abb. 3.23 sind für verschiedene Simulationszeiten die Werte von  $U_{\kappa t}^x(t, T)$  aufgetragen. Abb. 3.24 zeigt im gleichen Temperaturbereich  $U_{XYt}^x(t, T)$ . Während erstere recht deutlich einen Schnitt bei  $T_c^\kappa \approx 1.503$  zeigt, ist dieses Verhalten in Abb. 3.24 nicht zu sehen. Vielmehr scheint sich anzudeuten, daß sich die Kurven deutlich unterhalb von  $T = 1.45$  kreuzen.

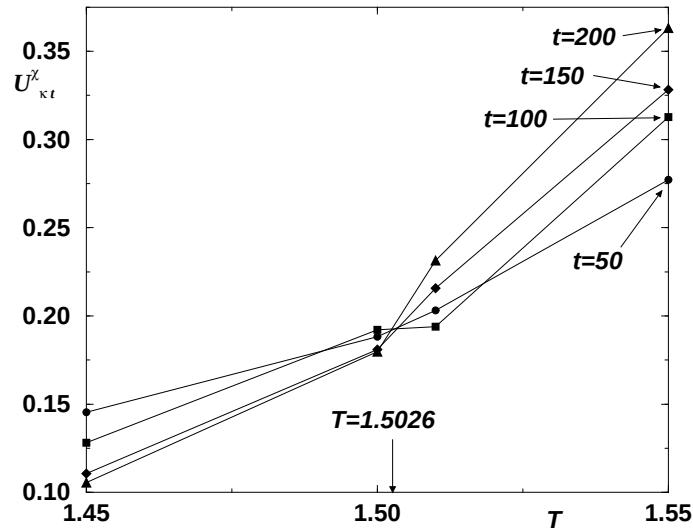


Abbildung 3.23:  $U_{\kappa t}^x(t, T)$  für verschiedene  $t$  in Abhängigkeit von der Temperatur.

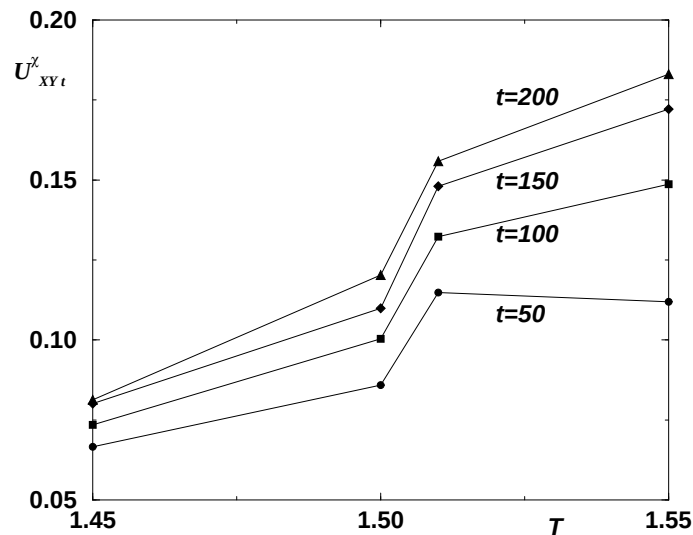
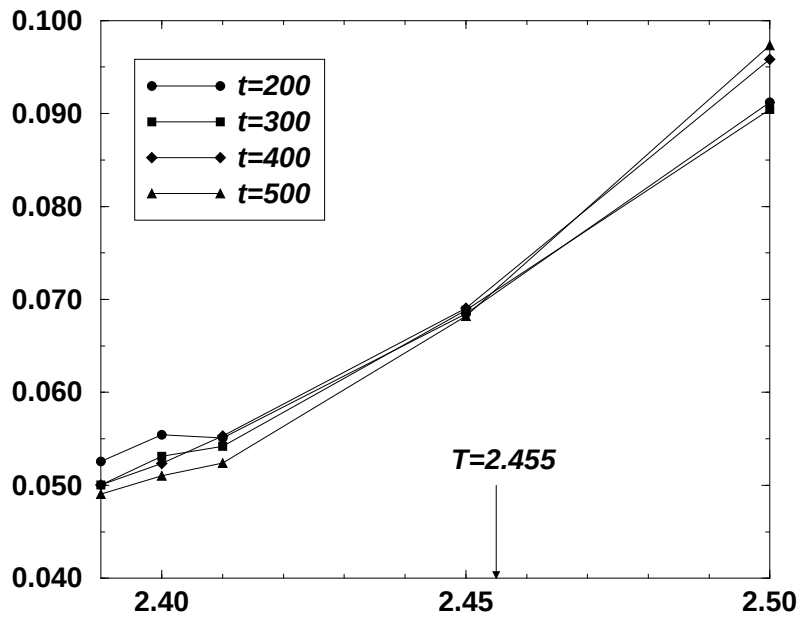


Abbildung 3.24:  $U_{XYt}^x(t, T)$  für verschiedene  $t$  in Abhängigkeit von der Temperatur.

## Zwei Übergänge?

Es stellt sich an dieser Stelle die Frage, ob möglicherweise zwei Übergänge auftreten, zunächst ein *Ising*-Übergang ( $Z_2 \rightarrow 1$ ) und bei einer etwas tieferen Temperatur dann  $O(2) \rightarrow O(1)$ . Diese Erscheinung ist bekannt [186, 66] insbesondere für das Stiefel-Modell auf einem Quadratgitter. Für den Fall, daß es sich in der Tat um zwei Übergänge handelt, ist als zweiter Übergang ein *Kosterlitz-Thouless* Phasenübergang (s. Abschnitt 1.1.2) zu erwarten. Die Exponenten des *Ising*-Übergangs müßten dann mit denen eines *Ising*-Modells auf einem  $ME_{42}^{3D}$  verglichen werden.

Um einen Vergleich zu ermöglichen, wurden die obigen Simulationen auf einem *Ising*-Modell wiederholt. Die kritische Temperatur läßt sich bereits recht gut durch Untersuchung des statischen kritischen Verhaltens abschätzen, jedoch bringt  $U_t^\chi$  ein genaueres Ergebnis  $T_c^{Ising} = 2.455(5)$  (s. Abb 3.25, der Fehler ist geschätzt)



**Abbildung 3.25:**  $U^\chi(t, T)$  für das *Ising*-Modell verschiedene  $t$  in Abhängigkeit von der Temperatur.

Bei  $T = 2.45$  und damit in der unmittelbaren Umgebung wurden dann die folgenden Exponenten mit der Methode des *dynamic scaling* für das  $ME_{42}^{3D}(3, 0)$  ermittelt:

$$\beta^{Ising} = 0.559(3) \quad (3.76)$$

$$\gamma^{Ising} = 1.707(7) \quad (3.77)$$

Da vor allem der Einfluß der Temperatur bisher noch nicht systematisch untersucht wurde, sind die angegebenen Fehler nur die der Statistik und daher sicherlich um eine Größenordnung zu klein.

Die Simulation des Stiefel-Modells auf dem  $ME_{42}^{3D}(3, 0)$  bei  $T_c^{\text{Stiefel}} = 1.5026$  brachte für die Exponenten der Chiralität:

$$\beta^{\text{Stiefel-Chiralität}} = 0.690(5) \quad (3.78)$$

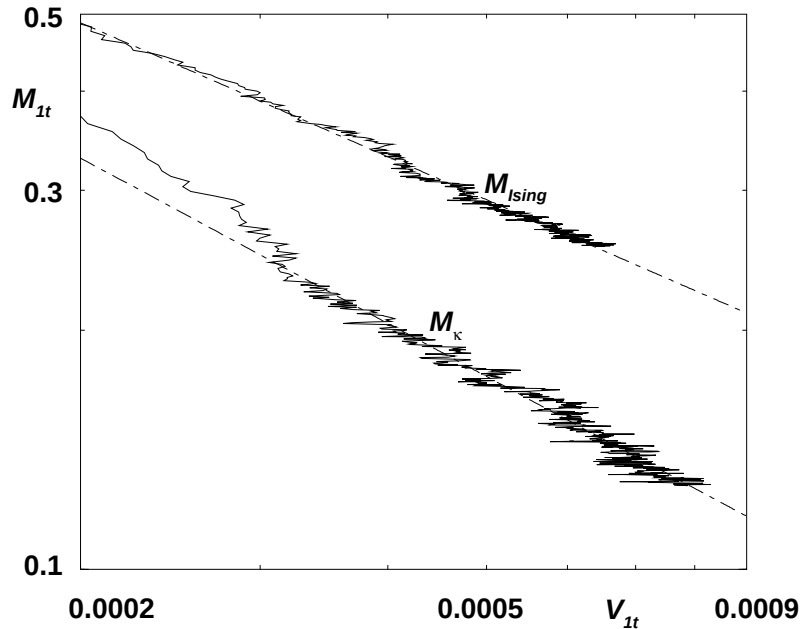
$$\gamma^{\text{Stiefel-Chiralität}} = 1.225(9) \quad (3.79)$$

bzw. für die Exponenten von  $\mathbf{M}_{XY}$

$$\beta^{\text{Stiefel-XY}} = 0.864(5) \quad (3.80)$$

$$\gamma^{\text{Stiefel-XY}} = 1.179(9) \quad (3.81)$$

Zum direkten Vergleich des Verhaltens des *Ising*-Systems und der Chiralität des Stiefel-Modells sind in Abb. 3.26 die Ordnungsparameter in Abhängigkeit von  $V_{1t}$  dargestellt und Abb. 3.27 die Suszeptibilitäten in Abhängigkeit von  $V_{1t}$ . Diese Ergebnisse las-



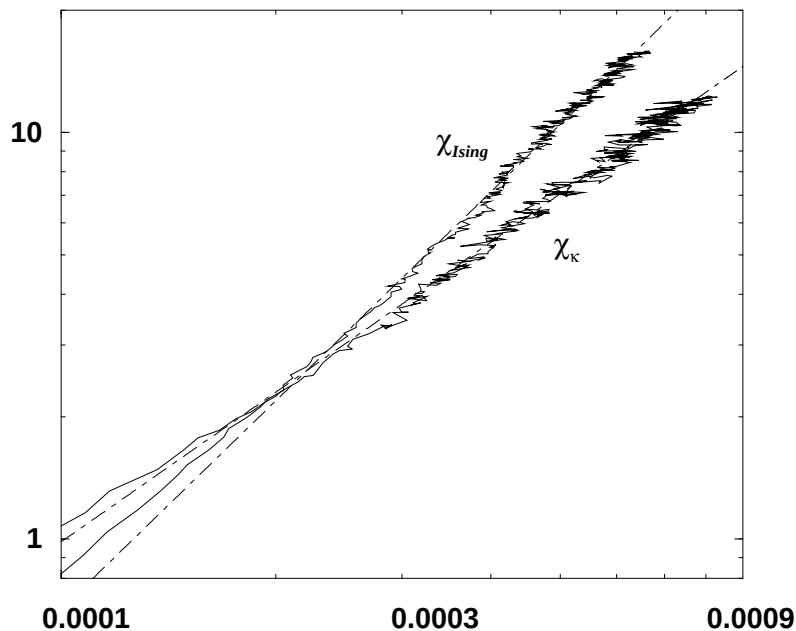
**Abbildung 3.26:** Dynamik der Magnetisierung des *Ising*-Modells  $M_{Ising}$  und der Chiralität des Stiefel-Modells  $M_{\kappa}$  im Vergleich. Gestrichelt sind die jeweiligen Ergebnisse für  $\beta$  eingetragen.

sen keinen eindeutigen Schluß zu. Die Exponenten des Stiefel-Modells sind verschieden für die verschiedenen Komponenten des Ordnungsparameters aber doch vor allem in  $\gamma$  deutlich verschieden von denen des *Ising*-Modells. Es ist denkbar, daß eine Korrektur in Temperatur-Schätzung dazu führt, daß die Simulationen dann konsistente Ergebnisse liefern, die allerdings erst nach Fertigstellung dieser Arbeit vorliegen werden.

### 3.3.5 Zusammenfassung und Kritik

Ein Ziel konnte erreicht werden: In der Tat findet man auch bei gebrochenen Dimensionen in der unmittelbaren Nähe von  $d_{\mathcal{H}} = 3$  für das Stiefel-Modell einen Phasenübergang erster Ordnung. Die weiterführende Frage, ob dieser sich wie erwartet in einen einzigen Phasenübergang zweiter Ordnung umwandelt, wenn die *Hausdorff*-Dimension noch weiter abgesenkt wird, konnte jedoch nicht abschließend beantwortet werden. Bei genauerem Hinsehen läßt sich nicht einmal zuverlässig die Frage beantworten, wieviele Phasenübergänge beobachtet werden und von welcher Ordnung sie sind. Dies ist jedoch nicht auf methodische Probleme zurückzuführen, sondern in erster Linie auf mangelnde CPU-Zeit. Es ist davon auszugehen, daß die Frage in nächster Zeit geklärt werden wird.

Einerseits ist das Ergebnis sicherlich enttäuschend: Trotz der erheblichen methodischen Vorarbeiten und den großen numerischen Aufwand bleibt die Frage unbeantwortet. Ande-



**Abbildung 3.27:** Dynamik der Suszeptibilität des *Ising*-Modells  $\chi_{Ising}$  und der Suszeptibilität der Chiralität  $\chi_\kappa$  des Stiefel-Modells im Vergleich. Gestrichelt sind die jeweiligen Ergebnisse für  $\gamma$  eingetragen.

rerseits stellt die Perspektive, es möglicherweise mit einem KT-Übergang zu tun zu haben, eine ganz neuen, spannenden Aspekt dar.

### 3.4 Zusammenfassung und Ausblick

Nachdem die Resultate vorgestellt wurden, stellt sich die Frage, inwiefern diese Arbeit ihrem Titel gerecht werden kann. Die zentrale Frage nach Ordnung und Universalitätsklasse eines Phasenübergang wurde bei  $d_{\mathcal{H}} = 2.9656 \dots$  in Übereinstimmung mit Simulationen bei  $d_{\mathcal{H}} = 3$  und letzten analytischen Resultaten beantwortet: Es handelt sich um eine starke erste Ordnung. Im Falle von  $d_{\mathcal{H}} = 2.5$  gibt es Hinweise auf einen oder zwei Phasenübergänge zweiter Ordnung. Handelt es sich um einen einzigen Übergang, so wäre dies ein weiteres Indiz für die Richtigkeit der Renormierungsgruppe. In dieser Arbeit kann die abschließende Antwort auf diese Frage nicht gegeben werden. Jedoch sind Methoden entwickelt worden, die es ermöglichen werden die Frage zu beantworten:  $\chi/\chi'$  (3.1) und  $U_t$  (3.3) in Zusammenhang mit *dynamic scaling* und möglicherweise der Histogramm-Methode (Anhang C). Sie sind notwendig geworden, nachdem die Analyse des *Ising*-Modells auf einem fraktalen Gitter gezeigt hatte, daß die leistungsfähigste Methode, das FSS, auf solchen Gittern scheitert.

Die Publikation der hier vorgestellten Ergebnisse wird eine eingehende Analyse mit den hier vorgestellten Methoden notwendig machen und die Frage dann sicherlich beantworten.

# Remerciements - Danksagung

Tout d'abord, je tiens à remercier chaleureusement mon tuteur, *Dr. Damien Loison* pour le temps et les efforts qu'il a investi pour me faire connaître le sujet, pour toujours avoir été disponible pour des entretiens, pour m'avoir fait partager ses idées, ce qui n'a peut-être pas été sans influencer sur sa part du gâteau (I know, minus one million point, but it doesn't matter anyway). Je remercie le professeur *Dr. K.-D. Schotte* pour le grand intérêt qu'il porte à ce travail et pour les contributions importantes qu'il a apporté. Je le remercie également pour l'atmosphère agréable et positive ainsi que pour la créativité constante et constructive qui régnait et règne encore au sein de notre groupe. Je remercie les autres membres de notre groupe de travail ainsi que ceux des groupes de travail du professeur *Forstmann* et du professeur *Peschel*, que je tiens à remercier tout particulièrement pour la bienveillance et l'ouverture d'esprit dont il a fait preuve à mon égard.

Je pense qu'il convient de souligner que je n'aurais pas pu réaliser ce travail, qui a fait partie des meilleurs moments que j'ai passé au cours de mes études, si les conditions de travail n'avaient pas été aussi agréables.

Je remercie l'administration informatique du service spécialisé, et en particulier *Dr. Pleiter*, Madame *Nicolescu* et Monsieur *W. Klaus*, pour le soutien qu'ils m'ont apporté ainsi que pour la mise à disposition et l'entretien résolu des ressources. Je remercie également la ZEDAT (en particulier Monsieur *Riedel*, abacus 2) et les (anciens) collaborateurs de la ZEDV, Messieurs *Scheelkenmann*, *Onnen* et *Dr. W.D. Woidt* qui n'ont pas hésité à mettre à ma et Monsieur *Loison* disposition leurs ordinateurs personnels ("mr. Loison is eating up my computer").

Je tiens aussi à remercier mes parents pour leur soutien, sans lequel j'aurais jamais pu suivre ces études. Je remercie mon épouse pour sa contribution implicite et explicite à ce travail.

An erster Stelle möchte ich meinem Betreuer *Herrn Dr. Damien Loison* von ganzem Herzen danken: Für die Zeit und Mühe, die er darauf verwendet hat, mich in das Thema einzuführen, für seine kontinuierliche Bereitschaft zur Diskussion, für die Möglichkeit an seinen Ideen teilzuhaben, vielleicht nicht ohne Abstriche für seinen Kuchen (I know, minus one million point, but it doesn't matter anyway). Ich danke *Herrn Prof. Dr. K.-D. Schotte* für sein großes Interesse an und seinen umfangreichen Beiträgen zu dieser Arbeit und für die angenehme, positive Atmosphäre kontinuierlicher, konstruktiver Kreativität, die in unserer Arbeitsgruppe herrschte und herrscht. Den weiteren Mitgliedern unserer Arbeitsgruppe sowie denen der Arbeitsgruppen von *Herrn Prof. Forstmann* und *Herrn Prof. Peschel* und explizit diesen persönlich danke ich für die Freundlichkeit und Aufgeschlossenheit, die sie mir entgegengebracht haben.

Ich denke, es ist wert zu betonen, daß diese Arbeit, die den schönsten Abschnitt meines Studiums zusammenfaßt, ohne diese angenehmen Umstände nicht möglich gewesen wäre.

Ich bedanke mich bei der EDV-Administration des Fachbereichs, insbesondere *Herrn Dr. Pleiter*, *Frau Nicolescu* und *Herrn W. Klaus*, für ihre Unterstützung sowie für die Bereitstellung und engagierte Pflege der Ressourcen, ebenso der ZEDAT (besonders *Herrn Riedel*, abacus2) und den (ehemaligen) Mitarbeitern der ZEDV, *Herrn Scheelkenmann*, *Herrn Onnen* und *Herrn Dr. W.D. Woidt*, die *Herrn Loison* und mir zum Teil sogar ihre privaten Rechner zur Verfügung gestellt haben („mr. loison is eating up my computer...“).

Ich möchte meinen Eltern für ihre Unterstützung danken, ohne die ich mein Studium niemals hätte aufnehmen können. Ich danke meiner Frau für ihren impliziten und expliziten Beitrag zu dieser Arbeit.

# Anhang A

## Heatbath-Algorithmus für XY-Spins

### A.1 Einleitung

Der Heatbath-Algorithmus wurde bereits in Abschnitt 2.2.2 erklärt. In der Übergangswahrscheinlichkeit (2.46)

$$W(\Sigma \rightarrow \Sigma') = \frac{e^{-\beta E_{\Sigma'}}}{\sum_{\Sigma''} e^{-\beta E_{\Sigma'}}} \quad (\text{A.1})$$

geht für kontinuierliche Modelle die Normierung in ein Integral über. Die Wahrscheinlichkeit für einen Spin, den Winkel  $\theta_i$  zum lokalen Feld der Stärke  $m_i$  einzunehmen ist dann

$$W(\theta_i, m_i) = \frac{e^{-J\beta m_i \cos(\theta_i)}}{\int_0^{2\pi} e^{-J\beta m_i \cos(\theta_i)} d\theta} \quad , \quad (\text{A.2})$$

wobei

$$\mathbf{m}_i = \sum_{j.n.n.i} \mathbf{s}_j \quad (\text{A.3})$$

die Summe der benachbarten Spins und  $m_i = |\mathbf{m}_i|$  ist. Im Gegensatz zum dreidimensionalen Fall  $n = 3$ , wo das Integral im Nenner auch für beliebige Grenzen

$$2\pi \int e^{-Jm \cos(\theta)} \sin(\theta) d\theta = \frac{2\pi}{Jm} e^{-Jm \cos(\theta)} \quad (\text{A.4})$$

geschlossen darstellbar ist, ist das für das XY-Modell nicht der Fall. In der Folge findet man auch keine Realisierung dieses Integrals auf gängiger Computerhardware.

Um die Übergangswahrscheinlichkeitsverteilung zu realisieren, muß die Gleichverteilung auf einem Intervall oBdA  $[0, 1[$ , wie sie von praktisch allen Zufallszahlengeneratoren erzeugt wird, transformiert werden. Eine Transformation  $T(r)$ , die jeder Zufallszahl  $r$  einen Winkel  $\theta = T(r) : [0, 1[ \rightarrow [0, \pi[$  zuordnet, muß dann die Eigenschaft haben, daß die Wahrscheinlichkeit für  $T(r) = \theta$  gerade die gesuchte Verteilung ist:

$$P(r | T(r) = \theta) dr = P(r | T(r) = \theta) \frac{1}{T'} d\theta = W(\theta) d\theta \quad (\text{A.5})$$

mit  $T' = \frac{dT}{dr}$ . Es ist demnach  $1/T' = W(\theta)$  gefordert oder  $r = \int_0^\theta W(\theta') d\theta'$  und daher

$$T = \left[ \int W(\theta) d\theta \right]^{-1}(r) \quad , \quad (\text{A.6})$$

wobei die hochgestellte  $-1$  die Umkehrfunktion bezeichnen soll.

## A.2 Numerische Realisierung

Wie bereits oben angegeben, hängt die Übergangswahrscheinlichkeit vom lokalen Feld und der Temperatur ab. Es ist daher die Umkehrfunktion der zunächst nicht normierten Verteilung

$$f(\theta, a) = \int_0^\theta e^{-a \cos(\phi)} d\phi \quad (\text{A.7})$$

gesucht. Entwickelt man  $f$  in  $\theta$  um  $\theta_0$  bis zur zweiten Ordnung

$$f(\theta_0 + \Delta\theta, a) = f(\theta_0, a) + \Delta\theta f'(\theta_0, a) + \frac{\Delta\theta^2}{2} f''(\theta_0, a) + \mathcal{O}(\Delta\theta^3) \quad , \quad (\text{A.8})$$

dann läßt sich die Umkehrfunktion  $f^{-1}(r, a)$  mit  $f(f^{-1}(r, a), a) = r$  direkt notieren. Wenn keine der Ableitungen verschwindet, findet man

$$\Delta\theta = \frac{f'(\theta_0, a)}{f''(\theta_0, a)} \left( \sqrt{\frac{2f''(\theta_0, a)(r - f(\theta_0, a))}{f'(\theta_0, a)}} - 1 \right) \quad . \quad (\text{A.9})$$

Die verschiedenen Fälle, daß eine der Ableitung verschwindet, sind selbstverständlich entsprechend zu behandeln:

$$\Delta\theta = \frac{r - f(\theta_0, a)}{f'(\theta_0, a)} \quad \text{für } f''(\theta_0, a) = 0 \quad (\text{A.10})$$

$$\Delta\theta = \sqrt{\frac{2(r - f(\theta_0, a))}{f''(\theta_0, a)}} \quad \text{für } f'(\theta_0, a) = 0 \quad (\text{A.11})$$

$$\Delta\theta = 0 \quad \text{für } f'(\theta_0, a) = 0 \text{ und } f''(\theta_0, a) = 0 \quad . \quad (\text{A.12})$$

Prima facie liegt das weitere Verfahren nun auf der Hand: Die Zufallszahl  $r$  wird aus dem Intervall ausgewählt, ein passender Satz von Ableitungen  $f$ ,  $f'$  und  $f''$  herausgesucht und  $\theta = \theta_0 + \Delta\theta$  berechnet.<sup>1</sup> Um jedoch einen *passenden* Satz der Ableitungen angeben zu können, bedarf es bereits einer Kenntnis des  $\theta_0$  und damit der ungefähren Kenntnis von  $\theta$ . Einen Ausweg aus diesem Dilemma findet man, indem man  $f$  und seine beiden Ableitungen als Tabelle mit äquidistantem  $r$  speichert. Im Intervall  $[0, 1[$  werden also äquidistant  $N$  Stützstellen  $r_i$  ausgewählt, ausgehend von der davor liegenden Stützstelle eine erste Schätzung für  $\theta_{0i}$  berechnet und dann iterativ auf Grundlage der neuen Stützstelle bei  $\theta_{0i}$  so lange korrigiert bis  $r_i - f(\theta_{0i}, a) = 0$ .

Wie bereits oben angesprochen ist  $f$  neben  $\theta$  noch von einem zweiten Parameter  $a$  abhängig. Entsprechend müssen die Ableitungen  $f$ ,  $f'$  und  $f''$  zusätzlich noch in  $a$  entwickelt werden. In dieser Arbeit wurde die Entwicklung mit der zweiten Ordnung abgebrochen. Man berechnet nun also

$$f(\theta_{0i}, a) = \int_0^{\theta_{0i}} e^{-a \cos(\phi)} d\phi \quad (\text{A.13})$$

$$f'(\theta_{0i}, a) = e^{-a \cos(\theta_{0i})} \quad (\text{A.14})$$

$$f''(\theta_{0i}, a) = a \sin(\theta_{0i}) e^{-a \cos(\theta_{0i})} \quad (\text{A.15})$$

<sup>1</sup>Gibt es dann keine Lösung für  $\Delta\theta$ , ist also das Argument der Wurzel negativ, muß eine neue Zufallszahl gezogen werden. Für die unten genannten Parametern, tritt dieser Fall, der auf zu wenige Stützstellen zurückzuführen ist, etwa einmal in zehntausend Versuchen auf. Man könnte darüberhinaus auch noch prüfen, ob das Ergebnis der Interpolation möglicherweise jenseits der nächsten Stützstelle liegt und ggf. mehr erzeugen.

und der Vollständigkeit halber

$$\frac{\partial}{\partial a} f(\theta_{0i}, a) = - \int_0^{\theta_{0i}} \cos(\phi) e^{-a \cos(\phi)} d\phi \quad (\text{A.16})$$

$$\frac{\partial}{\partial a} f'(\theta_{0i}, a) = - \cos(\theta_{0i}) e^{-a \cos(\theta_{0i})} \quad (\text{A.17})$$

$$\frac{\partial}{\partial a} f''(\theta_{0i}, a) = (1 - a \cos(\theta_{0i})) \sin(\theta_{0i}) e^{-a \cos(\theta_{0i})} \quad (\text{A.18})$$

$$\frac{\partial^2}{\partial a^2} f(\theta_{0i}, a) = \int_0^{\theta_{0i}} \cos^2(\phi) e^{-a \cos(\phi)} d\phi \quad (\text{A.19})$$

$$\frac{\partial^2}{\partial a^2} f'(\theta_{0i}, a) = \cos^2(\theta_{0i}) e^{-a \cos(\theta_{0i})} \quad (\text{A.20})$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial^2}{\partial a^2} f''(\theta_{0i}, a) &= - \cos(\theta_{0i}) \sin(\theta_{0i}) e^{-a \cos(\theta_{0i})} \\ &\quad - (1 - a \cos(\theta_{0i})) \cos(\theta_{0i}) \sin(\theta_{0i}) e^{-a \cos(\theta_{0i})} . \end{aligned} \quad (\text{A.21})$$

Um numerische Fehler zu minimieren, wird man  $N = 2^k + 1$  Stützstellen (mit je einer an der Rändern) auf den benötigten Intervallen für  $r$  und  $a$  verteilen. Auf diese Weise ist die Distanz zwischen den Stützstellen nur ein Bit-Shift der Intervallgröße. Dem rechten Rand kommt eine besondere Bedeutung zu, da er die Normierung liefert: Eine Zufallszahl  $r$  wird mit der Normierung multipliziert, und dann erst wird die Umkehrfunktion angewandt.

In der Simulation haben sich 513 Stützstellen in  $a$  und 1025 Stützstellen in  $r$  bewährt. Eine solche Tabelle zu berechnen, dauert unter Verwendung der Integration `qsimp` aus [94] etwa 30 Minuten auf einem i586-200. In der Simulation dauert ein *sweep* des Heatbath-Algorithmus dann etwa 1.5–2 mal so lang wie in einem *Metropolis*-Algorithmus (s. beispielsweise Tabelle 3.5) und entspricht damit den in der Literatur bekannten Werten [187].

Daneben existiert noch eine weitere Methode, die letztlich darauf beruht, die Verteilung durch eine analytische Funktion anzunähern und den Fehler der Näherung durch **rejection** zu korrigieren [188]. Diese Methode hat den entscheidenden Nachteil, neben dem Problem einer divergierenden rejection rate, was sich noch korrigieren läßt [189], sehr teure Funktionen einzusetzen, so daß zu erwarten ist, daß ihre Laufzeit bestenfalls das Dreifache des *Metropolis*-Algorithmus beträgt. Im Stiefel-Modell kann dieses Verfahren gar nicht angewendet werden, denn die Verteilung der Chiralitäts-Variablen verhält sich wie

$$\int_0^{2\pi} e^{-\cos(\theta) m_a^+} d\theta : \int_0^{2\pi} e^{-\cos(\theta) m_a^-} d\theta \quad , \quad (\text{A.22})$$

wobei

$$m_a^+ = \sum_{a.nn.i} (1 + \sigma_i) \mathbf{s}_i \quad (\text{A.23})$$

$$m_a^- = \sum_{a.nn.i} (1 - \sigma_i) \mathbf{s}_i \quad (\text{A.24})$$

Das Integral muß also berechnet werden, denn eine getrennte, individuelle Behandlung der Chiralität als *Ising*-Spin-Flip im lokalen Feld, und der XY-Variablen zerstört die *detailed balance*: Wenn man eine Konfigurationsänderung betrachtet, bei der Chiralität und danach XY-Spins geändert wurden, so ist für den invertierten Weg die Wahrscheinlichkeitsverteilung für den Flip der Chiralität eine völlig andere als für den Hinweg.



## Anhang B

# Jackknife: Verallgemeinerte Näherungen

### B.1 Einleitung

Das Prinzip des Jackknife besteht darin, aus einer gegebenen Stichprobe durch Entfernen einzelner Elemente neue Stichproben zu erzeugen. Auf Grundlage dieser *subsamples* werden dann Mittelwerte und Varianzen bestimmt. Auf den ersten Blick ist das *subsampling* notwendig mit der Speicherung aller Elemente der Stichprobe verbunden. Bei genauem Hinsehen läßt sich jedoch näherungsweise eine allgemeine Vereinfachung für Polynome und Polynombrüche finden. Die Ergebnisse dieser Vereinfachung wurden in Abschnitt 2.3 vorgestellt. Hier sollen diese Ergebnisse im Detail hergeleitet werden.

### B.2 Schätzer für ein Polynom

Wie bereits in Abschnitt 2.3 Gleichung (2.65) wird das Polynom  $F$  definiert als

$$F(x_1, x_2, \dots, x_\nu) = \sum_{i_1 i_2 \dots i_\nu} a_{i_1 i_2 \dots i_\nu} x_1^{i_1} x_2^{i_2} \dots x_\nu^{i_\nu} \quad , \quad (\text{B.1})$$

wobei  $\nu$  die Zahl der Variablen bezeichnet. Der Jackknife-*estimator* für  $F$ , der Schätzer  $\langle F \rangle_J$ , ist dann definiert durch

$$\langle F \rangle_J = \frac{1}{N} \sum_{j=1}^N (F)_{Jj} \quad (\text{B.2})$$

mit

$$(F)_{Jj} = F((x_1)_{Jj}, (x_2)_{Jj}, \dots, (x_\nu)_{Jj}) \quad (\text{B.3})$$

und einer Stichprobe mit  $N$  Elementen. Die Jackknife-Variablen  $(x_i)_{Jj}$  sind wie in (2.54) definiert:

$$(x_i)_{Jj} = \frac{1}{N-1} \sum_{\substack{k \\ k \neq j}}^N (x_i)_k = \frac{N \tilde{x}_i - (x_i)_j}{N-1} \quad , \quad (\text{B.4})$$

wobei  $(x_i)_k$  den Wert der Observablen  $x_i$  im  $k$ ten Element der Stichprobe bezeichnet.

Die obige Gleichung (B.3) läßt sich dann leicht umschreiben:

$$(F)_{Jj} = F((x_1)_{Jj}, (x_2)_{Jj}, \dots, (x_\nu)_{Jj}) \quad (\text{B.5})$$

$$= \sum_{i_1 i_2 \dots i_\nu} a_{i_1 i_2 \dots i_\nu} \quad (\text{B.6})$$

$$\begin{aligned} & \times \left( \frac{N\widetilde{x_1} - (x_1)_j}{N-1} \right)^{i_1} \left( \frac{N\widetilde{x_2} - (x_2)_j}{N-1} \right)^{i_2} \dots \left( \frac{N\widetilde{x_\nu} - (x_\nu)_j}{N-1} \right)^{i_\nu} \\ & = \sum_{i_1 i_2 \dots i_\nu} a_{i_1 i_2 \dots i_\nu} \left( \frac{N}{N-1} \right)^{(i_1+i_2+\dots+i_\nu)} \widetilde{x_1}^{i_1} \widetilde{x_2}^{i_2} \dots \widetilde{x_\nu}^{i_\nu} \\ & - \frac{1}{N} \sum_{i_1 i_2 \dots i_\nu} a_{i_1 i_2 \dots i_\nu} \left( \frac{N}{N-1} \right)^{(i_1+i_2+\dots+i_\nu)} \widetilde{x_1}^{i_1} \widetilde{x_2}^{i_2} \dots \widetilde{x_\nu}^{i_\nu} \\ & \times \left( i_1 \frac{(x_1)_j}{\widetilde{x_1}} + i_2 \frac{(x_2)_j}{\widetilde{x_2}} \dots + i_\nu \frac{(x_\nu)_j}{\widetilde{x_\nu}} \right) + \\ & \mathcal{O}(N^{-2}) \quad , \end{aligned} \quad (\text{B.7})$$

indem man die ersten beiden Ordnungen der Potenzen der Klammern der Form

$$\left( \frac{N\widetilde{x_1} - (x_1)_j}{N-1} \right)^{i_1}$$

notiert und dabei

$$\left( \frac{N}{N-1} \right)^k = 1 + \frac{k}{N} + \mathcal{O}(N^{-2}) \quad (\text{B.8})$$

verwendet. Der Schätzer (B.2) läßt sich mit dieser Vereinfachung ebenfalls umschreiben:

$$\langle F \rangle_J = \frac{1}{N} \sum_{j=1}^N (F)_{Jj} \quad (\text{B.9})$$

$$= \sum_{i_1 i_2 \dots i_\nu} a_{i_1 i_2 \dots i_\nu} \left( \frac{N}{N-1} \right)^{i_1+i_2+\dots+i_\nu} \quad (\text{B.10})$$

$$\begin{aligned} & \left( 1 - \frac{i_1+i_2+\dots+i_\nu}{N} \right) \widetilde{x_1}^{i_1} \widetilde{x_2}^{i_2} \dots \widetilde{x_\nu}^{i_\nu} \\ & + \mathcal{O}(N^{-2}) \end{aligned}$$

$$= \sum_{i_1 i_2 \dots i_\nu} a_{i_1 i_2 \dots i_\nu} \widetilde{x_1}^{i_1} \widetilde{x_2}^{i_2} \dots \widetilde{x_\nu}^{i_\nu} + \mathcal{O}(N^{-2}) \quad (\text{B.11})$$

$$= \widetilde{F} + \mathcal{O}(N^{-2}) \quad , \quad (\text{B.12})$$

wobei

$$\left( \frac{N}{N-1} \right)^k \frac{1}{N} = \frac{1}{N} + \mathcal{O}(N^{-2}) \quad . \quad (\text{B.13})$$

verwendet wurde. Die letzte Zeile enthält  $\widetilde{F}$  das konsequenterweise als

$$\widetilde{F} = F(\widetilde{x_1}, \widetilde{x_2}, \dots, \widetilde{x_\nu}) \quad (\text{B.14})$$

definiert ist. Gleichung (B.12) bedeutet, daß der Jackknife-Schätzer von  $F$  nichts weiter als die Funktion  $F$  der Mittelwerte ist: Es gibt keine Korrekturen erster Ordnung.

### B.3 Schätzer für einen Bruch

Bevor der Jackknife-Schätzer für einen Bruch ausgerechnet werden kann, muß das bisherige Resultat umformuliert werden. Mit (B.8) und (B.13) läßt sich (B.6) schreiben als

$$(F)_{Jj} = \tilde{F} + \frac{1}{N}(\tilde{F} - \check{F}_j) + \mathcal{O}(N^{-2}) \quad . \quad (\text{B.15})$$

Dabei wurden die beiden Funktionen  $\tilde{F}$  und  $\check{F}_j$  verwendet. Sie sind definiert durch

$$\begin{aligned} \check{F}_j &= \check{F}((x_1)_j, (x_2)_j, \dots, (x_\nu)_j) \\ &= \sum_{i_1 i_2 \dots i_\nu} a_{i_1 i_2 \dots i_\nu} \widetilde{x_1^{i_1}} \widetilde{x_2^{i_2}} \dots \widetilde{x_\nu^{i_\nu}} \end{aligned} \quad (\text{B.16})$$

$$\begin{aligned} \hat{F}(x_1, x_2, \dots, x_\nu) &= \sum_{j=1}^N \check{F}((x_1)_j, (x_2)_j, \dots, (x_\nu)_j) \\ &= \sum_{i_1 i_2 \dots i_\nu} a_{i_1 i_2 \dots i_\nu} \widetilde{x_1^{i_1}} \widetilde{x_2^{i_2}} \dots \widetilde{x_\nu^{i_\nu}} \end{aligned} \quad (\text{B.17})$$

$$\begin{aligned} &= \sum_{i_1 i_2 \dots i_\nu} a_{i_1 i_2 \dots i_\nu} \widetilde{x_1^{i_1}} \widetilde{x_2^{i_2}} \dots \widetilde{x_\nu^{i_\nu}} \\ &\quad (i_1 + i_2 + \dots + i_\nu) \end{aligned} \quad (\text{B.18})$$

Darüberhinaus wird

$$\tilde{F} = \hat{F}(\widetilde{x_1}, \widetilde{x_2}, \dots, \widetilde{x_\nu}) \quad (\text{B.19})$$

benötigt. Die genannten Größen haben dann die Eigenschaft

$$\frac{1}{N} \sum_{j=1}^N \check{F}_j = \hat{F}(\widetilde{x_1}, \widetilde{x_2}, \dots, \widetilde{x_\nu}) = \tilde{F} \quad . \quad (\text{B.20})$$

Zusammen mit dem Ergebnis (B.12) bedeutet das

$$(F)_{Jj} - \langle F \rangle_J = \frac{1}{N}(\tilde{F} - \check{F}_j) + \mathcal{O}(N^{-2}) \quad . \quad (\text{B.21})$$

Die Funktion  $H$  wird nun analog zu  $F$  erklärt:

$$H(x_1, x_2, \dots, x_\nu) = \sum_{i_1 i_2 \dots i_\nu} b_{i_1 i_2 \dots i_\nu} x_1^{i_1} x_2^{i_2} \dots x_\nu^{i_\nu} \quad . \quad (\text{B.22})$$

Für den Kehrwert von der  $(H)_{Jj}$  entwickelt man mit (B.15)

$$\begin{aligned} ((H)_{Jj})^{-1} &= (\tilde{H})^{-1} \left( 1 - \frac{\check{H}_j - \tilde{H}}{N\tilde{H}} + \mathcal{O}(N^{-2}) \right)^{-1} \\ &= \frac{1}{\tilde{H}} \left( 1 + \frac{\check{H}_j - \tilde{H}}{N\tilde{H}} \right) + \mathcal{O}(N^{-2}) \quad , \end{aligned} \quad (\text{B.23})$$

wobei natürlich angenommen werden muß, daß  $(H)_{Jj} \neq 0$ . Man findet dann für den Quotienten  $\langle F/H \rangle_J$ :

$$\left\langle \frac{F}{H} \right\rangle_J = \frac{1}{N} \sum_{j=1}^N \frac{(F)_{Jj}}{(H)_{Jj}} \quad (\text{B.24})$$

$$= \frac{1}{N} \sum_{j=1}^N \frac{(F)_{Jj}}{\tilde{H}} \left( 1 + \frac{\check{H}_j - \tilde{H}}{N\tilde{H}} \right) + \mathcal{O}(N^{-2}) \quad (\text{B.25})$$

$$= \frac{1}{N} \sum_{j=1}^N \frac{\tilde{F}}{\tilde{H}} \left( 1 + \frac{\check{H}_j - \tilde{H}}{N\tilde{H}} \right) \quad (\text{B.26})$$

$$+ \frac{1}{N} \sum_{j=1}^N \frac{\tilde{F} - \check{F}_j}{N\tilde{H}} \left( 1 + \frac{\check{H}_j - \tilde{H}}{N\tilde{H}} \right) + \mathcal{O}(N^{-2})$$

$$= \frac{\tilde{F}}{\tilde{H}} + \mathcal{O}(N^{-2}) \quad , \quad (\text{B.27})$$

wobei zweimal Gebrauch von (B.20) gemacht wurde. Das Ergebnis in Abschnitt B.2, wonach es keine Korrekturen erster Ordnung gibt, ist damit auf einen Bruch erweitert.

## B.4 Schätzer für die Varianz eines Polynoms

Mit etwas mehr Mühe lassen sich nun auch Schätzer für die Varianzen angeben. Sie sind definiert durch

$$(s^2(\langle F \rangle_J))_J = \frac{N-1}{N} \sum_{i=1}^N ((F)_{Ji} - \langle F \rangle_J)^2 \quad . \quad (\text{B.28})$$

Dann ergibt sich mit (B.21) und (B.20) sofort

$$(s^2(\langle F \rangle_J))_J = \frac{N-1}{N^3} \sum_{j=1}^N (\tilde{F} - \check{F}_j)^2 + \mathcal{O}(N^{-2}) \quad (\text{B.29})$$

$$= \frac{N-1}{N^3} \sum_{j=1}^N (\check{F}_j^2 - \tilde{F}^2) + \mathcal{O}(N^{-2}) \quad . \quad (\text{B.30})$$

Die Schwierigkeit besteht nun offenbar darin,  $\check{F}_j^2$  zu berechnen:

$$\frac{1}{N} \sum_{j=1}^N \check{F}_j^2 = \sum_{j=1}^N \left[ \sum_{i_1 i_2 \dots i_\nu} a_{i_1 i_2 \dots i_\nu} \widetilde{x_1^{i_1}} \widetilde{x_2^{i_2}} \dots \widetilde{x_\nu^{i_\nu}} \right. \quad (\text{B.31})$$

$$\left. \left( i_1 \frac{(x_1)_j}{\widetilde{x_1}} + i_2 \frac{(x_2)_j}{\widetilde{x_2}} \dots + i_\nu \frac{(x_\nu)_j}{\widetilde{x_\nu}} \right) \right]^2 \quad (\text{B.32})$$

$$= \frac{1}{N} \sum_{j=1}^N \sum_{\substack{i_1 i_2 \dots i_\nu \\ i'_1 i'_2 \dots i'_\nu}} a_{i_1 i_2 \dots i_\nu} a_{i'_1 i'_2 \dots i'_\nu} \quad (\text{B.33})$$

$$\widetilde{x_1^{(i_1+i'_1)}} \widetilde{x_2^{(i_2+i'_2)}} \dots \widetilde{x_\nu^{(i_\nu+i'_\nu)}}$$

$$\sum_{\substack{\kappa=1,2,\dots,\nu \\ \lambda=1,2,\dots,\nu}} i_\kappa i'_\lambda \frac{(x_{i_\kappa})_j (x_{i'_\lambda})_j}{\widetilde{x_{i_\kappa}} \widetilde{x_{i'_\lambda}}} \quad .$$

Die äußere Summation läßt sich nun ausführen:

$$\begin{aligned} \frac{1}{N} \sum_{j=1}^N \check{F}_j^2 &= \sum_{\substack{i_1 i_2 \dots i_\nu \\ i'_1 i'_2 \dots i'_\nu}} a_{i_1 i_2 \dots i_\nu} a_{i'_1 i'_2 \dots i'_\nu} \widetilde{x_1^{(i_1+i'_1)}} \widetilde{x_2^{(i_2+i'_2)}} \dots \widetilde{x_\nu^{(i_\nu+i'_\nu)}} \\ &\times \sum_{\substack{\kappa=1,2,\dots,\nu \\ \lambda=1,2,\dots,\nu}} i_\kappa i'_\lambda \frac{\widetilde{x_{i_\kappa} x_{i'_\lambda}}}{\widetilde{x_{i_\kappa} x_{i'_\lambda}}} . \end{aligned} \quad (\text{B.34})$$

Von diesem Ausdruck muß nun  $\widetilde{F}^2$  abgezogen werden, um  $(s^2(\langle F \rangle_J))_J$  zu berechnen. Das Quadrieren von  $\widetilde{F}^2$  führt strukturell zu einem ähnlichen Ergebnis wie (B.34):

$$\widetilde{F}^2 = \left( \sum_{i_1 i_2 \dots i_\nu} a_{i_1 i_2 \dots i_\nu} \widetilde{x_1^{i_1}} \widetilde{x_2^{i_2}} \dots \widetilde{x_\nu^{i_\nu}} (i_1 + i_2 + \dots + i_\nu) \right)^2 \quad (\text{B.35})$$

$$\begin{aligned} &= \sum_{\substack{i_1 i_2 \dots i_\nu \\ i'_1 i'_2 \dots i'_\nu}} a_{i_1 i_2 \dots i_\nu} a_{i'_1 i'_2 \dots i'_\nu} \widetilde{x_1^{(i_1+i'_1)}} \widetilde{x_2^{(i_2+i'_2)}} \dots \widetilde{x_\nu^{(i_\nu+i'_\nu)}} \\ &\times \sum_{\substack{\kappa=1,2,\dots,\nu \\ \lambda=1,2,\dots,\nu}} i_\kappa i'_\lambda . \end{aligned} \quad (\text{B.36})$$

Nun kann die Differenz der beiden Ausdrücke gebildet werden und man erhält insgesamt

$$\begin{aligned} (s^2(F))_J &= \frac{1}{N} \sum_{\substack{i_1 i_2 \dots i_\nu \\ i'_1 i'_2 \dots i'_\nu}} a_{i_1 i_2 \dots i_\nu} a_{i'_1 i'_2 \dots i'_\nu} \widetilde{x_1^{(i_1+i'_1)}} \widetilde{x_2^{(i_2+i'_2)}} \dots \widetilde{x_\nu^{(i_\nu+i'_\nu)}} \\ &\times \sum_{\substack{\kappa=1,2,\dots,\nu \\ \lambda=1,2,\dots,\nu}} i_\kappa i'_\lambda \frac{\widetilde{x_{i_\kappa} x_{i'_\lambda}} - \widetilde{x_{i_\kappa} x_{i'_\lambda}}}{\widetilde{x_{i_\kappa} x_{i'_\lambda}}} \\ &+ \mathcal{O}(N^{-2}) , \end{aligned} \quad (\text{B.37})$$

wobei  $\frac{N-1}{N^2} = \frac{1}{N} + \mathcal{O}(N^{-2})$  verwendet wurde.

Es ist an dieser Stelle interessant, mit dem *Gauß*'schen Fehler (2.52) zu vergleichen. Er bildet sich als Summe der Einzelfehler gewichtet mit der Ableitung der Funktion nach der jeweiligen Variablen. Für ein Polynom ist dann einfach

$$\Delta(F) = \sum_{i_1 i_2 \dots i_\nu} a_{i_1 i_2 \dots i_\nu} \widetilde{x_1^{i_1}} \widetilde{x_2^{i_2}} \dots \widetilde{x_\nu^{i_\nu}} \left( i_1 \frac{\Delta(\widetilde{x_1})}{\widetilde{x_1}} + i_2 \frac{\Delta(\widetilde{x_2})}{\widetilde{x_2}} + \dots + i_\nu \frac{\Delta(\widetilde{x_\nu})}{\widetilde{x_\nu}} \right) . \quad (\text{B.38})$$

Quadriert man (B.38) und ersetzt  $\Delta(\widetilde{x_\kappa})\Delta(\widetilde{x_\lambda})$  durch  $\widetilde{x_\kappa x_\lambda} - \widetilde{x_\kappa} \widetilde{x_\lambda}$  erhält man (B.37).

## B.5 Schätzer für die Varianz eines Bruchs

Abschließend soll nun der Schätzer für die Varianz eines Bruchs hergeleitet werden. Mit (B.24) erhält man

$$\frac{(F)_{Jj}}{(H)_{Jj}} - \left\langle \frac{F}{H} \right\rangle_J = \frac{\widetilde{F}}{\widetilde{H}} \frac{\check{H}_j - \widetilde{H}}{N \widetilde{H}} + \frac{\widetilde{F} - \check{F}_j}{N \widetilde{H}} + \mathcal{O}(N^{-2}) \quad (\text{B.39})$$

und daher ist

$$(s^2(F/H))_J = \frac{N-1}{N} \sum_{j=1}^N \left( \frac{(F)_{Jj}}{(H)_{Jj}} - \left\langle \frac{F}{H} \right\rangle_J \right)^2 \quad (\text{B.40})$$

$$\begin{aligned} &= \frac{N-1}{N^3} \sum_{j=1}^N \frac{\tilde{F}^2}{\tilde{H}^4} (\check{H}_j - \tilde{H})^2 \\ &+ \frac{1}{\tilde{H}^2} (\check{F}_j - \tilde{F})^2 \\ &- 2 \frac{\tilde{F}}{\tilde{H}^3} (\check{H}_j - \tilde{H})(\check{F}_j - \tilde{F}) + \mathcal{O}(N^{-2}) \quad , \end{aligned} \quad (\text{B.41})$$

wobei bereits (B.29) verwendet wurde. Mit dieser Gleichung für  $(s^2(F))_J$  und  $(s^2(H))_J$  erhält man

$$\begin{aligned} (s^2(F/H))_J &= \frac{\tilde{H}^2(s^2(F))_J + \tilde{F}^2(s^2(H))_J}{\tilde{H}^4} \\ &- 2 \frac{N-1}{N^3} \sum_{j=1}^N \frac{\tilde{F}}{\tilde{H}^3} (\check{H}_j - \tilde{H})(\check{F}_j - \tilde{F}) + \mathcal{O}(N^{-2}) \quad . \end{aligned} \quad (\text{B.42})$$

An diesen Gleichungen liest man bereits die interessante Eigenschaft nämlich bereits

$$(s^2(F/H))_J = \frac{\tilde{H}^4}{\tilde{F}^4} (s^2(H/F))_J + \mathcal{O}(N^{-2}) \quad (\text{B.43})$$

ab, wie es vom *Gauß*'schen Fehler (2.52) vorausgesagt wird:

$$\Delta\left(\frac{F}{H}\right) = \frac{F^2}{H^2} \Delta\left(\frac{H}{F}\right) \quad . \quad (\text{B.44})$$

Um Gleichung (B.42) wirklich verwenden zu können, muß noch der letzte Term auf Mittelwerte zurückgeführt werden. Man erhält mit (B.20)

$$\frac{N-1}{N^3} \sum_{j=1}^N (\check{H}_j - \tilde{H})(\check{F}_j - \tilde{F}) \quad (\text{B.45})$$

$$= \frac{1}{N^2} \sum_{j=1}^N \left( \check{H}_j \check{F}_j - \tilde{H} \tilde{F} \right) \quad (\text{B.46})$$

$$\begin{aligned} &= \frac{1}{N} \sum_{\substack{i_1 i_2 \dots i_\nu \\ i'_1 i'_2 \dots i'_\nu}} b_{i_1 i_2 \dots i_\nu} a_{i'_1 i'_2 \dots i'_\nu} \widetilde{x_1^{(i_1+i'_1)}} \widetilde{x_2^{(i_2+i'_2)}} \dots \widetilde{x_\nu^{(i_\nu+i'_\nu)}} \\ &\quad \sum_{\substack{\kappa=1,2,\dots,\nu \\ \lambda=1,2,\dots,\nu}} i_\kappa i'_\lambda \frac{\widetilde{x_{i_\kappa} x_{i'_\lambda}} - \widetilde{x_{i_\kappa}} \widetilde{x_{i'_\lambda}}}{\widetilde{x_{i_\kappa}} \widetilde{x_{i'_\lambda}}} \\ &+ \mathcal{O}(N^{-2}) \quad , \end{aligned} \quad (\text{B.47})$$

was sich von (B.37) nur durch die Ersetzung  $a \rightarrow b$  im ersten Faktor unterscheidet.

## Anhang C

$$\partial_\beta \langle M \rangle_t = \langle M \rangle_t \langle E \rangle_t - \langle ME \rangle_t ?$$

### C.1 Einleitung

Hier soll die im Titel genannte Gleichung für den sequentiellen **Heatbath-Algorithmus** auf dem **Ising-Modell** untersucht werden. Dabei bezeichnet  $\langle M \rangle_t$  die in der Dynamik untersuchte Magnetisierung zum Zeitpunkt  $t$  und die Schwierigkeit besteht darin, daß die Differentialgleichung nur im Gleichgewicht gültig ist und dort unmittelbar aus der Definition des Gleichgewichts-Erwartungswertes  $\langle M \rangle$  folgt:

$$\langle M \rangle = \frac{\sum_\Sigma M(\Sigma) e^{-\beta E(\Sigma)}}{\sum_\Sigma e^{-\beta E(\Sigma)}} \quad , \quad (\text{C.1})$$

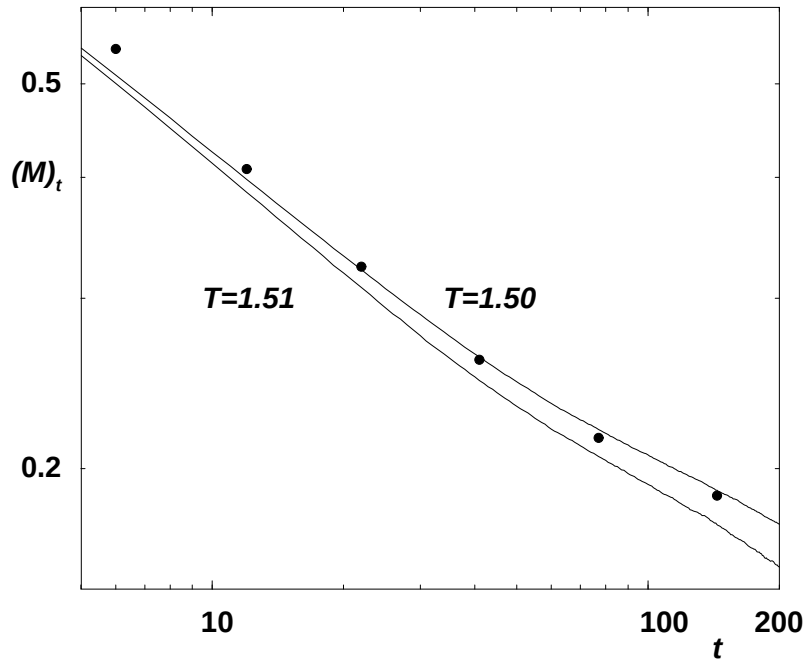
wobei die Summe über alle Zustände  $\Sigma$  läuft. Die Frage ist nun, ob die Verteilung zu jedem Zeitpunkt  $t$  und insbesondere außerhalb des Gleichgewichts möglicherweise die gleiche Eigenschaft hat. Numerische Untersuchungen zeigen genau das und *Zheng* selbst schlägt die Berechnung von  $\partial_\beta \langle M \rangle_t$  durch höhere Ordnungen in [115] vor, ohne sie jedoch zu verwenden. Genau genommen ist der einzige Zugang zu der dringend benötigten Größe  $\partial_T \langle M \rangle_t$  ein Differenzenquotient, der im Zusammenhang mit dieser Arbeit aber nur vergleichsweise herangezogen wurde und verrauschte, aber kompatible Ergebnisse liefert.

Darüberhinaus impliziert  $\partial_\beta \langle M \rangle_t = \langle M \rangle_t \langle E \rangle_t - \langle ME \rangle_t$  für die Verteilungsfunktion  $Q_t(\Sigma, \beta)$  der Zustände  $\Sigma$  zum Zeitpunkt  $t$  die Form  $Q_t(\Sigma, \beta) = Q_t^0(\Sigma) e^{-\beta E(\Sigma)}$ . An dieser Stelle läßt sich dann die gleiche Herleitung wie in Abschnitt 2.4 machen und die kritische Dynamik würde „Histogramm-fähig“. Tatsächlich zeigt sich sogar dieses Verhalten. In Abb. C.1 ist die Chiralität eines Stiefel-Modells dargestellt. Die Linien zeigen die Simulationen bei den Temperaturen  $T = 1.50$  und  $T = 1.51$ . Die Punkte sind mit Hilfe der Histogramm-Methode berechnete Schätzungen für den Verlauf bei  $T = 1.50$  auf Grundlage der Daten bei  $T = 1.50$ . In Abb. C.2 ist dasselbe für die Energie dargestellt.

Es ist bisher noch nicht systematisch untersucht worden, in welchen Grenzen die Histogramm-Methode hier wirklich funktioniert. Die hier dargestellte Herleitung von  $\partial_\beta \langle M \rangle_t = \langle M \rangle_t \langle E \rangle_t - \langle ME \rangle_t$  ist daher lediglich als Vorschlag zu verstehen.

### C.2 Beweisidee

Gerade in den Sechzigern und Siebzigern war das Interesse groß, die Dynamik der simulierten Systeme zu verstehen, u.a. um Relaxations- und Korrelationszeiten abzuschätzen [85, 190]. Diese Ansätze sind hier jedoch wenig hilfreich, weil sie gerade in der Nähe von  $T_c$  Schwierigkeiten haben [85] oder auf MF-Überlegungen zurückgehen [191]. Daneben gibt es



**Abbildung C.1:** Die Histogramm-Methode angewandt auf die  $M_\kappa$ -Daten einer Simulation des Stiefel-Modells bei  $T = 1.51$  reproduziert die Daten der direkten Simulation bei  $T = 1.50$  recht gut, zumal das Histogramm mit nur 2000 Einträgen sehr klein (mindestens zwei Größenordnungen zu klein) ist. Die Histogramme wurden nur für die eingezeichneten Zeiten  $t$  erzeugt. Zu beachten ist hier, daß es sich *nicht* um ein *Ising*-Modell handelt, sonder um die *Ising*-Variable eines Stiefel-Modells.

eine ganze Reihe von Untersuchungen an sehr konkreten Modellen, wie der Spinkette, auf der auch die Dynamik des **Glauber-Modells** diskutiert wird [192]. Arbeiten zur mikroskopischen Dynamik im Kontext der makroskopischen [112] kritischen Kurzzeit-Dynamik sind dem Autor nicht bekannt.

Die Größe  $g_{ij}^{(k)}$  soll im folgenden die Übergangswahrscheinlichkeit vom Zustand  $\Sigma_i$  zum Zustand  $\Sigma_j$  bezeichnen, wobei sich die beiden Zustände höchstens in einem einzigen Spin, nämlich dem Spin  $k$ , unterscheiden sollen. Um dann die Übergangswahrscheinlichkeit für einen vollständigen *sweep* über alle  $N$  Spins darzustellen, müßte man dann

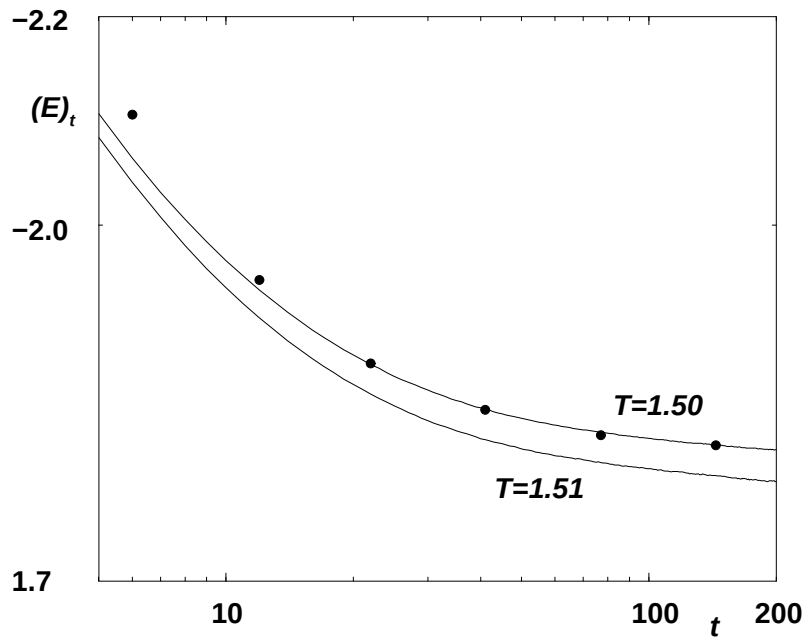
$$\sum_{\Sigma_{i_1} \setminus \Sigma_0 \subseteq \{s_1\}} \sum_{\Sigma_{i_2} \setminus \Sigma_{i_1} \subseteq \{s_2\}} \cdots \sum_{\Sigma_{i_N} \setminus \Sigma_{i_{N-1}} \subseteq \{s_N\}} g_{i_0 i_1}^{(1)} g_{i_1 i_2}^{(2)} \cdots g_{i_{N-1} i_N}^{(N)} \quad (\text{C.2})$$

schreiben, wobei  $\Sigma_j \setminus \Sigma_i \subseteq \{s_j\}$  bedeuten soll, daß sich die beiden Zustände höchstens in  $s_j$  unterscheiden. Der Zustand  $\Sigma_{i_0}$  soll den Ausgangszustand bezeichnen. Aus Gründen der Lesbarkeit soll (C.2), sofern es auf Details nicht ankommt, im folgenden einfach

$$\sum_{i_1} \sum_{i_2} \cdots \sum_{i_N} g_{i_0 i_1} g_{i_1 i_2} \cdots g_{i_{N-1} i_N} \quad (\text{C.3})$$

notiert werden. Daneben soll die Zeit  $t$  nicht mehr die Zahl der sweeps sondern die Zahl der Einzelspin-Updates bezeichnen, in der bisherigen Notation  $tN$ . Dann läßt sich  $\langle M \rangle_t$  schreiben als

$$\langle M \rangle_t = \sum_{i_1} \sum_{i_2} \cdots \sum_{i_t} g_{i_0 i_1} g_{i_1 i_2} \cdots g_{i_{t-1} i_t} M(\Sigma_t) \quad , \quad (\text{C.4})$$



**Abbildung C.2:** Die Histogramm-Methode angewandt auf die  $E$ -Daten einer Simulation des Stiefel-Modells bei  $T = 1.51$  reproduziert die Daten der direkten Simulation bei  $T = 1.50$  sehr gut. Die Histogramme wurden nur für die eingezeichneten Zeiten  $t$  erzeugt.

wobei  $M(\Sigma_t)$  die Magnetisierung im Zustand  $\Sigma_t$  bezeichnen soll. Für den Heatbath-Algorithmus auf dem *Ising*-Modell, auf das sich die folgenden Betrachtungen beschränken, läßt sich  $g_{ij}$  schreiben als

$$g_{ij}^{(k)} = \frac{e^{-\beta E(\Sigma_j)}}{e^{-\beta E(\Sigma_i)} + e^{-\beta E(\Sigma_i \times (-1)^{(k)})}} = \frac{e^{-\beta(E(\Sigma_j) - E(\Sigma_i))}}{1 + e^{-\beta \Delta E(\Sigma_i, k)}} \quad , \quad (\text{C.5})$$

wobei  $\Sigma_i \times (-1)^{(k)}$  den Zustand  $\Sigma_i$  bezeichnen soll, bei dem der  $k$ te Spin invertiert wurde. Die Energiedifferenz zwischen diesen beiden Zuständen sei

$$\Delta E(\Sigma_i, k) = E(\Sigma_i \times (-1)^{(k)}) - E(\Sigma_i) \quad , \quad (\text{C.6})$$

und daher ist  $E(\Sigma_j) - E(\Sigma_i)$  entweder 0 oder gerade  $\Delta E(\Sigma_i, k)$ . Die Ableitung nach  $\beta$  ist dann einfach

$$\partial_\beta g_{ij}^{(k)} = -(E(\Sigma_j) - E(\Sigma_i))g_{ij}^{(k)} + \Delta E(\Sigma_i, k)g_{ij}^{(k)} \frac{e^{-\beta \Delta E(\Sigma_i, k)}}{1 + e^{-\beta \Delta E(\Sigma_i, k)}} \quad . \quad (\text{C.7})$$

Setzt man diesen Ausdruck in die Ableitung von (C.4) ein, dann läßt sich bereits der Ursprung von  $\langle ME \rangle_t$  ablesen:

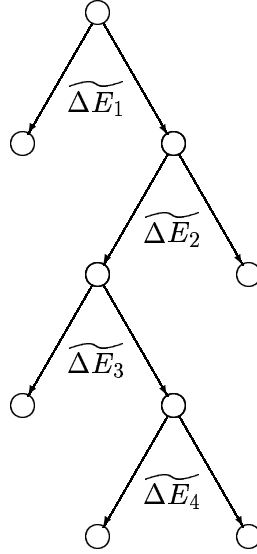
$$\left. \begin{aligned} \partial_\beta \langle M \rangle_t &= \sum_{i_1} \sum_{i_2} \cdots \sum_{i_t} g_{i_0 i_1} g_{i_1 i_2} \cdots g_{i_{t-1} i_t} M(\Sigma_{i_t}) \\ &\times \left( \sum_{k=1}^t \Delta E(\Sigma_{i_{k-1}}, 1+k \bmod N) \frac{e^{-\beta \Delta E(\Sigma_{i_{k-1}}, 1+k \bmod N)}}{1 + e^{-\beta \Delta E(\Sigma_{i_{k-1}}, 1+k \bmod N)}} \right) \end{aligned} \right\} \quad (\text{C.8})$$

$$- \sum_{i_1} \sum_{i_2} \cdots \sum_{i_t} g_{i_0 i_1} g_{i_1 i_2} \cdots g_{i_{t-1} i_t} \left( \sum_{k=1}^t E(\Sigma_{i_k}) - E(\Sigma_{i_{k-1}}) \right) \quad . \quad (\text{C.9})$$

Die letzte Summe in (C.9) teleskopiert, wird  $E(\Sigma_t) - E(\Sigma_0)$  und ergibt damit  $\langle ME \rangle_t - E(\Sigma_0) \langle M \rangle_t$ . Die Summe in der zweiten Zeile stellt nun das eigentliche Problem dar. Offenbar handelt es sich um einen Erwartungswert,

$$\widetilde{\Delta E}(\Sigma_i, k) = \Delta E(\Sigma_i, k) \frac{e^{-\beta \Delta E(\Sigma_i, k)}}{1 + e^{-\beta \Delta E(\Sigma_i, k)}} \quad , \quad (\text{C.10})$$

nämlich um die mittlere Energiedifferenz, die der Algorithmus erzeugt, wenn er im Zustand  $\Sigma_i$  des Systems den Spin  $k$  „anfaßt“. Es handelt sich jedoch *nicht* um den Erwartungswert der Energiedifferenz insgesamt, denn die  $\widetilde{\Delta E}(\Sigma_i, k)$  sind insbesondere vom Ausgangszustand abhängig und mitteln über nur zwei mögliche Zielzustände. Abb. C.3 soll das verdeutlichen. Es soll nun gezeigt werden, daß diese Summe



**Abbildung C.3:** Während die Mittelwerte der Energie aus beiden möglichen Zuständen bestimmt werden, wird nur einer wirklich erreicht.

$$\sum_{k=1}^t \widetilde{\Delta E}(\Sigma_{i_{k-1}}, k \bmod N) \quad , \quad (\text{C.11})$$

wie sie in (C.8) auftaucht, sehr schnell gegen den Mittelwert der Energiedifferenz

$$\langle E \rangle_t - E(\Sigma_0) = \sum_{i_1} \sum_{i_2} \cdots \sum_{i_t} g_{i_0 i_1} g_{i_1 i_2} \cdots g_{i_{t-1} i_t} E(\Sigma_{i_t}) - E(\Sigma_0) \quad (\text{C.12})$$

konvergiert. Damit wäre der gesuchte Ausdruck gefunden.

Zunächst soll gezeigt werden, daß dieses Konvergenzverhalten überhaupt zu erwarten ist. Die Summanden der zweiten Zeile des Ausdrucks

$$\begin{aligned} & \sum_{i_1} \sum_{i_2} \cdots \sum_{i_t} g_{i_0 i_1} g_{i_1 i_2} \cdots g_{i_{t-1} i_t} \\ & \times \left( \sum_{k=1}^t \widetilde{\Delta E}(\Sigma_{i_{k-1}}, 1 + k \bmod N) \right) \end{aligned} \quad (\text{C.13})$$

lassen sich einzeln aus der Summe herausnehmen. Da die  $g_{ij}$  normiert sind, findet man dann

$$\sum_{i_1} \sum_{i_2} \cdots \sum_{i_t} g_{i_0 i_1} g_{i_1 i_2} \cdots g_{i_{t-1} i_t} \widetilde{\Delta E}(\Sigma_{i_{k-1}}, 1 + k \bmod N) \quad (\text{C.14})$$

$$= \sum_{i_1} \sum_{i_2} \cdots \sum_{i_{k-1}} g_{i_0 i_1} g_{i_1 i_2} \cdots g_{i_{k-2} i_{k-1}} \widetilde{\Delta E}(\Sigma_{i_{k-1}}, 1 + k \bmod N) \quad . \quad (\text{C.15})$$

Mit der Definition von  $\widetilde{\Delta E}$  (C.10) und mit (C.6) ist das wegen

$$\widetilde{\Delta E}(\Sigma_{i_{k-1}}, 1 + k \bmod N) = \sum_{i_k} g_{i_{k-1} i_k} \left( E(\Sigma_{i_k}) - E(\Sigma_{i_{k-1}}) \right) \quad (\text{C.16})$$

aber gerade  $\langle E \rangle_k - \langle E \rangle_{k-1}$  und die Summe (C.13), teleskopiert zu  $\langle E \rangle_t - E(\Sigma_0)$ .

Diese Vereinfachung läßt sich jedoch auf (C.8) gar nicht anwenden, denn es enthält ja zusätzlich noch den Faktor  $M(\Sigma_{i_t})$ . Ersetzt man ihn durch eine Konstante  $C$  wird sofort  $\partial_\beta C = 0$  und es ergibt sich noch einmal

$$\sum_{i_1} \sum_{i_2} \cdots \sum_{i_t} g_{i_0 i_1} g_{i_1 i_2} \cdots g_{i_{t-1} i_t} \quad (\text{C.17})$$

$$\begin{aligned} & \times \left( \sum_{k=1}^t \widetilde{\Delta E}(\Sigma_{i_{k-1}}, 1 + k \bmod N) \right) \\ & = \langle E \rangle_t - E(\Sigma_0) \quad . \end{aligned} \quad (\text{C.18})$$

Die Näherungslösung ist nun von der Idee motiviert, daß sich das Histogramm lokaler Konfigurationen für die Pfade zu einem konkreten  $M$  nicht wesentlich vom Histogramm aller lokaler Konfigurationen zu allen  $M$  unterscheidet, vor allem nicht für große  $t$ . Um das zu quantifizieren, wird (C.8) umgeschrieben. Mit

$$PE(i_t) = \sum_{i_1} \sum_{i_2} \cdots \sum_{i_{t-1}} g_{i_0 i_1} g_{i_1 i_2} \cdots g_{i_{t-2} i_{t-1}} g_{i_{t-1} i_t} \quad (\text{C.19})$$

$$\times \left( \sum_{k=1}^t \widetilde{\Delta E}(\Sigma_{i_{k-1}}, 1 + k \bmod N) \right) \quad (\text{C.20})$$

erhält man für (C.8)

$$\sum_{i_t} PE(i_t) M(\Sigma_{i_t}) \quad . \quad (\text{C.21})$$

Mit (C.13) ist außerdem  $\widetilde{PE} = \sum_{i_t} PE(i_t) = \langle E \rangle_t - E(\Sigma_0)$ . Die Verteilung  $PE(i_t)$  läßt sich selbst wiederum zerlegen, nämlich für jedes  $k \in [1, t]$  in

$$PE_k(i_t) = \sum_{i_1} \sum_{i_2} \cdots \sum_{i_{t-1}} g_{i_0 i_1} g_{i_1 i_2} \cdots g_{i_{t-2} i_{t-1}} g_{i_{t-1} i_t} \quad (\text{C.22})$$

$$\times \widetilde{\Delta E}(\Sigma_{i_{k-1}}, 1 + k \bmod N) \quad . \quad (\text{C.23})$$

Es ist dieses  $PE_k(i_t)$  von dem nun gezeigt werden soll, daß es für kleine  $k$  bis auf die Normierung  $\widetilde{PE}_k = \sum_{i_t} PE_k(i_t)$  entspricht. Mit

$$P(i_t) = \sum_{i_1} \sum_{i_2} \cdots \sum_{i_{t-1}} g_{i_0 i_1} g_{i_1 i_2} \cdots g_{i_{t-2} i_{t-1}} g_{i_{t-1} i_t} \quad (\text{C.24})$$

ist

$$\begin{aligned} \frac{PE_k(i_t)}{P(i_t)} - \widetilde{PE}_k &= \sum_{i_1} \sum_{i_2} \cdots \sum_{i_{t-1}} g_{i_0 i_1} g_{i_1 i_2} \cdots g_{i_{t-2} i_{t-1}} \\ &\times \widetilde{\Delta E}(\Sigma_{i_{k-1}}, 1 + k \bmod N) \left( \frac{g_{i_{t-1} i_t}}{P(i_t)} - 1 \right) . \end{aligned} \quad (\text{C.25})$$

In Abhängigkeit von  $k$  lassen sich noch mehr Faktoren der Form  $g_{i_{t-1} i_t}$  in die letzte Klammer ziehen und es wird

$$\begin{aligned} \frac{PE_k(i_t)}{P(i_t)} - \widetilde{PE}_k &= \sum_{i_1} \sum_{i_2} \cdots \sum_{i_{k-1}} g_{i_0 i_1} g_{i_1 i_2} \cdots g_{i_{k-2} i_{k-1}} \\ &\cdot \widetilde{\Delta E}(\Sigma_{i_{k-1}}, 1 + k \bmod N) \left( \frac{\sum_{i_k} \sum_{i_{k+1}} \cdots \sum_{i_{t-1}} g_{i_{k-1} i_k} g_{i_k i_{k+1}} \cdots g_{i_{t-1} i_t}}{P(i_t)} - 1 \right) . \end{aligned} \quad (\text{C.26})$$

Im Zähler des Bruches in der Klammer steht die Wahrscheinlichkeit für den Übergang  $\Sigma_{i_{k-1}} \rightarrow \Sigma_{i_t}$  in  $t - k + 1$  Schritten und daher ist die letzte Klammer gerade ein Maß für den Unterschied zwischen der Wahrscheinlichkeit für  $\Sigma_{i_{k-1}} \rightarrow \Sigma_{i_t}$  und der Wahrscheinlichkeit für  $\Sigma_{i_0} \rightarrow \Sigma_{i_t}$ . Hierfür kann man annehmen, daß er als Korrelation exponentiell in  $t - k$  verschwindet.<sup>1</sup> Aber auch für  $k \rightarrow t$  verschwindet der Ausdruck für große  $t$ , weil die Energie exponentiell relaxiert (s. Abb. C.4) und daher angenommen werden kann, daß  $PE_k(i_t) \rightarrow 0$  exponentiell abfällt.

Unter diesen Annahmen ist also

$$PE_k(i_t) \approx P(i_t) \widetilde{PE}_k \quad (\text{C.27})$$

und wegen

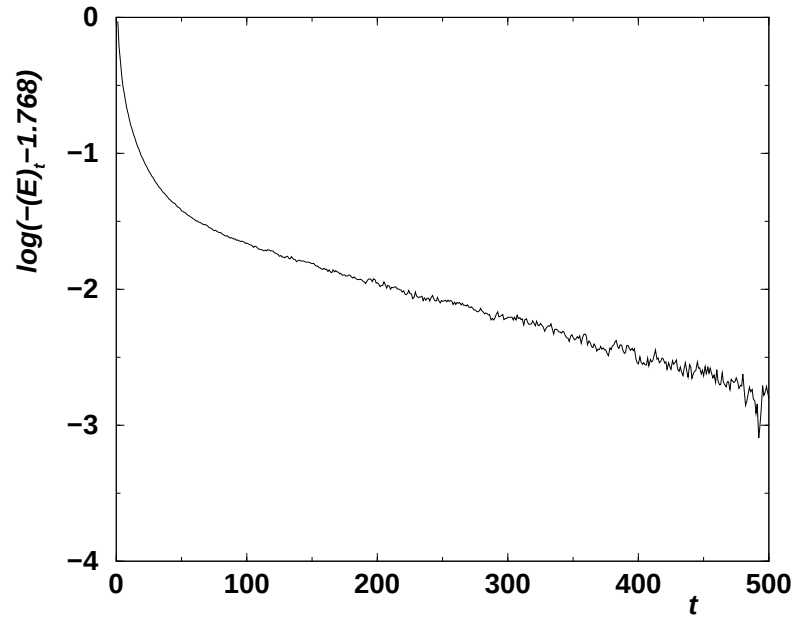
$$\sum_{k=1}^t PE_k(i_t) = PE(i_t) \quad (\text{C.28})$$

und

$$\sum_{k=1}^t \widetilde{PE}_k = \widetilde{PE} = \langle E \rangle_t - E(\Sigma_0) \quad (\text{C.29})$$

---

<sup>1</sup>Dieses exponentielle Verschwinden setzt nach einer Zeit ein, die in der Größenordnung von  $t_{mic}$  (s. Abschnitt (2.5)) liegt. Außerdem scheint der gesamte Relaxationsprozeß der Energie praktisch abgeschlossen zu sein, während etwa die Magnetisierung noch deutlich Dynamik zeigt. Es drängt sich daher die Frage auf, ob kritische Dynamik möglicherweise ausschließlich auf der Struktur oder Topologie des Phasenraums und der darin liegenden Gebiete gleicher Energie („Äquipotentialflächen“) d.h. Wahrscheinlichkeit beruht. Das hätte auf den ersten Blick zwei sehr weitreichende Konsequenzen: Zum einen würde die genaue Verteilungsfunktion keine Rolle mehr spielen, zum anderen hätte auch die Mikrokanonik einen Zugang zur Methode der kritischen Dynamik (wobei der Ausgangszustand einfach von einer kanonischen Simulation generiert werden könnte, die man lang genug ablaufen läßt). Mikrokanonische Simulationen haben den Vorteil, auf die teuren Exponentialfunktionen verzichten zu können und die Energie nicht teuer berechnen zu müssen.



**Abbildung C.4:** Die Energie  $\langle E \rangle_t$  relaxiert exponentiell schnell. Die Daten stammen wie auch schon in Abb. C.1 und Abb. C.1 aus einer Simulation des Stiefel-Modells bei  $T = 1.51$ . Der Untergrund, die kritische Energie  $E_c = -1.768$ , wurde vor dem Logarithmieren subtrahiert.

wird aus (C.21)

$$\sum_{i_t} P E(i_t) M(\Sigma_{i_t}) = \sum_k \widetilde{P E_k} \sum_{i_t} P(i_t) M(\Sigma_{i_t}) \approx (\langle E \rangle_t - E(\Sigma_0)) \langle M \rangle_t \quad . \quad (\text{C.30})$$

Insgesamt ergibt sich damit aus (C.8) und (C.9) der gesuchte Ausdruck

$$\partial_\beta \langle M \rangle_t = \langle M \rangle_t (\langle E \rangle_t - E(\Sigma_0)) - (\langle M E \rangle_t - \langle M \rangle_t E(\Sigma_0)) = \langle M \rangle_t \langle E \rangle_t - \langle M E \rangle_t \quad . \quad (\text{C.31})$$



# Literaturverzeichnis

- [1] E. Ising, Z. für Physik **31**, 253 (1925).
- [2] L. Onsager, Phys. Rev. **65**, 117 (1944).
- [3] B. M. McCoy and T. T. Wu, *The Two-dimensional Ising Model* (Harvard University Press, Cambridge, Massachusetts, 1973).
- [4] H. Kawamura, Phys. Rev. B **38**, 4916 (1988).
- [5] S. Antonenko and A.I.Sokolov, Phys. Rev. B **49**, 15901 (1994).
- [6] G. Zumbach, Phys. Rev. Lett. **71**, 2421 (1993).
- [7] M. Tissier, B. Delamotte, and D. Mouhanna, cond-mat/000135 1 (2000).
- [8] J. Binney, N. Dowrick, A. Fisher, and M. Newman, *The Theory of Critical Phenomena* (Clarendon Press, Oxford, 1998).
- [9] J. M. Yeomans, *Statistical Mechanics of Phase Transitions* (Clarendon Press, Oxford, 1994).
- [10] H. E. Stanley, *Introduction to Phase Transitions and Critical Phenomena* (Oxford University Press, New York, 1971).
- [11] M. Fisher, Rep. Prog. Phys. **30**, 615 (1967).
- [12] S.-K. Ma, *Modern Theory of critical Phenomena* (Addison Wesley, Reading, Massachusetts, 1976).
- [13] P. Pfeuty and G. Toulouse, *Introduction to the Renormalization Group and to Critical Phenomena* (John Wiley & Sons, Chichester, 1977).
- [14] H. J. Jensen, *Self-Organized Criticality* (Cambridge University Press, New York, NY, 1998).
- [15] G. Jaeger, Arch. Hist. Exact Sci. **53**, 51 (1998).
- [16] P. Ehrenfest, Verhandlingen der Koninklijke Akademie van Wetenschappen (Amsterdam) **36**, 153 (1933).
- [17] W. Nolting, *Grundkurs: Theoretische Physik* (Verlag Zimmermann-Neufang, Ulmen, Germany, 1991), Vol. 4; Spezielle Relativitätstheorie/ Thermodynamik.
- [18] W. Greiner, L. Neise, and H. Stöcker, *Theoretische Physik*, 2 ed. (Verlag Harri Deutsch, Thun and Frankfurt am Main, Germany, 1993), Vol. Bd. 9: Thermodynamik und Statistische Mechanik.

- [19] W. Nolting, *Quantentheorie des Magnetismus* (Teubner, Stuttgart, Germany, 1986).
- [20] G. Y. Onoda, P. J. Steinhardt, D. P. DiVincenzo, and J. E. Socolar, Phys. Rev. Lett. **60**, 2653 (1988).
- [21] R. Penrose, Bull. Inst. Math. Appl. **10**, 266 (1974).
- [22] M. Fisher, Phys. Rev. Lett. **29**, 917 (1972).
- [23] W. Gebhardt and U. Krey, *Phasenübergänge und kritische Phänomene* (Friedr. Vieweg & Sohn, Braunschweig/Wiesbaden, Germany, 1980).
- [24] B. Diu, C. Guthman, D. Lederer, and B. Roulet, *Grundlagen der statistischen Physik* (Walter de Gruyter, Berlin, Germany, 1994).
- [25] K. Huang, *Statistical Mechanics* (John Wiley & Sons, Chichester, 1987).
- [26] N. Mermin and H. Wagner, Phys. Rev. Lett. **17**, 1133 (1966).
- [27] V. Berenzinskiĭ, Sov. Phys., JETP **32**, 493 (1971).
- [28] V. Berenzinskiĭ, Sov. Phys., JETP **34**, 610 (1971).
- [29] J. Kosterlitz and D. Thouless, J. Phys. C: Solid State Phys. **6**, 1181 (1973).
- [30] J. Kosterlitz, J. Phys. C: Solid State Phys. **7**, 1046 (1974).
- [31] R. Kenna and A. Irving, hep-lat/9601029 (1996).
- [32] Anderson and Yuval, J. Phys. C **4**, 607 (1971).
- [33] F. J. Wegner, Phys. Rev. B **5**, 4529 (1972).
- [34] M. Hasenbusch and M. Caselle, J. Phys.A: Math. Gen. **30**, 4963 (1997).
- [35] M. Anisimov *et al.*, cond-mat/9810252v2 (1998).
- [36] A. Pelissetto, P. Rossi, and E. Vicari, cond-mat/9804264v3 (1998).
- [37] B. Widom, J. Chem. Phys. **43**, 3892 (1965).
- [38] B. Widom, J. Chem. Phys. **43**, 3898 (1965).
- [39] J. Cardy, *Scaling and Renormalization in Statistical Physics* (Cambridge University Press, New York, NY, 1996).
- [40] B. Josephson, Proc. Phys. Soc. **92**, 269 (1967).
- [41] B. Josephson, Proc. Phys. Soc. **92**, 276 (1967).
- [42] D. Lavis and G. Bell, *Statistical Mechanics of Lattice Systems 1; Closed Form and Exact Solutions* (Springer, Berlin Heidelberg New York, 1998).
- [43] D. Uzunov, *Theory Of Critical Phenomena* (World Scientific, Singapore, 1993).
- [44] L. Landau and E. Lifschitz, *Lehrbuch der Theoretischen Physik Band5; Statistische Physik 1* (Verlag Harri Deutsch, Thun and Frankfurt am Main, Germany, 1978).

- [45] N. Goldenfeld, *Lectures on Phase Transition and the Renormalization Group* (Perseus Books, Reading, Massachusetts, 1985).
- [46] M. Salmhofer, *Renormalization: an introduction* (Springer, Berlin Heidelberg New York, 1999).
- [47] M. E. Peskin and D. V. Schroeder, *An Introduction to Quantum Field Theory* (Addison Wesley, Reading, Massachusetts, 1995).
- [48] L. P. Kadanoff, *Physics* **2**, 263 (1966).
- [49] K. G. Wilson, *Phys. Rev. B* **4**, 3174 (1971).
- [50] K. G. Wilson, *Phys. Rev. B* **4**, 3184 (1971).
- [51] H. Kramers and G. Wannier, *Phys. Rev.* **60**, 252 (1941).
- [52] H. Kramers and G. Wannier, *Phys. Rev.* **60**, 263 (1941).
- [53] A. Migdal, *Sov. Phys.-JETP* **42**, 413 (1976).
- [54] L. P. Kadanoff, *Ann. Phys.* **100**, 359 (1976).
- [55] J. M. Carmona, U. M. B. Marconi, J. J. Ruiz-Lorenzo, and A. Tarancón, *cond-mat/9802018 v2* (1998).
- [56] D. Bailin, A. Love, and M. Moore, *J. Phys. C: Solid State Phys.* **10**, 1159 (1977).
- [57] H. Kleinert and V. Schulte-Frohlinde, *Critical Properties of  $\phi^4$ -Theories* (<http://www.physik.fu-berlin.de/~kleinert/>, Berlin, Germany, 1999).
- [58] G. Parisi, *Statistical Field Theory* (Perseus Books, Reading, Massachusetts, 1998).
- [59] K. G. Wilson and J. Kogut, *Phys. Rep.* **12C**, 77 (1974).
- [60] K. G. Wilson and M. E. Fisher, *Phys. Rev. Lett.* **28**, 240 (1972).
- [61] M. Fisher, *Phys. Rev. Lett.* **16**, 11 (1966).
- [62] J. A. Lipa *et al.*, *Phys. Rev. Lett.* **76**, 944 (1996).
- [63] A. P. Gottlob and M. Hasenbusch, *cond-mat/9404087* (1994).
- [64] J. L. Alonso *et al.*, *Phys. Rev. B* **53**, 2537 (1996).
- [65] D. Loison and K.-D. Schotte, *Euro. Phys. J. B* **5**, 735 (1998).
- [66] D. Loison, submitted to *Phys. Rev. B* (2000).
- [67] M. Plumer, A. Caillé, A. Mailhot, and H. Diep, in *Magnetic Systems with Competing Interaction*, edited by H. Diep (World Scientific, Singapore, 1994).
- [68] H. Kunz and G. Zumbach, *J. Phys. A: Math. Gen.* **26**, 3121 (1993).
- [69] Syozi, in *Phase Transition and Critical Phenomena*, edited by C. Domb and M. Green (Academic Press, New York, 1972), Vol. 2, pp. 443–501.

- [70] K. Binder, in *Phase Transition and Critical Phenomena*, edited by C. Domb and M. S. Green (Academic Press, New York, 1976), Vol. 5B, pp. 2–100.
- [71] R. J. Baxter, *Exactly Solved Models in Statistical Mechanics* (Academic Press, New York, 1982).
- [72] T. T. Wu, B. M. McCoy, C. A. Tracy, and E. Barouch, Phys. Rev. B **13**, 316 (1976).
- [73] G. A. Baker, Phys. Rev. **124**, 768 (1961).
- [74] J. W. Essam and M. E. Fisher, J. Chem. Phys. **38**, 802 (1963).
- [75] M. Sykes, D. Gaunt, P. Roberts, and J. Wyles, J. Phys. A: Gen. Phys. **5**, 624 (1972).
- [76] M. Hasenbusch and K. Pinn, J. Phys.A: Math. Gen. **31**, 6157 (1998).
- [77] A. L. Talapov and H. W. J. Blöte, J. Phys.A: Math. Gen. **29**, 5727 (1996).
- [78] P. Butera and M. Comi, hep-lat/9703018v3 (1997).
- [79] J. Zinn-Justin, *Quantum Field Theory and Critical Phenomena* (Clarendon Press, Oxford, 1997).
- [80] G. Grimmet and D. Stirzaker, *Probability and Random Processes*, 2 ed. (Oxford University Press, New York, 1992).
- [81] I. Farquhar, *Ergodic Theory in Statistical Mechanics* (John Wiley & Sons, London, New York, Sydney, 1964).
- [82] A. Khinchin, *Mathematical Foundations of Statistical Mechanics* (Dover Publications, Inc., New York, 1949).
- [83] D. J. Hartfiel, *Lecture Notes in Mathematics 1695; Markov Set-Chains* (Springer, Berlin Heidelberg New York, 1998).
- [84] B. Ferrenberg, Landau, J. Stat. Phys. **63**, 867 (1991).
- [85] H. Müller-Krumbhaar and K. Binder, J. Stat. Phys **8**, 1 (1973).
- [86] M. Newman and G. Barkema, *Monte Carlo Methods in Statistical Physics* (Oxford University Press, New York, 1999).
- [87] T. Anderson, *The Statistical Analysis of Time Series* (John Wiley & Sons, London, New York, Sydney, 1964).
- [88] N. Madras and A. D. Sokal, J. Stat. Phys. **50**, 109 (1988).
- [89] N. Metropolis *et al.*, J. Chem. Phys. **21**, 1087 (1953).
- [90] R. H. Swendsen and J.-S. Wang, Phys. Rev. Lett. **58**, 86 (1987).
- [91] J.-S. Wang and R. H. Swendsen, Physica A **167**, 565 (1990).
- [92] U. Wolff, Phys. Rev. Lett. **62**, 361 (1989).
- [93] U. Wolff, Nucl. Phys. B **334**, 581 (1990).

- [94] W. H. Press, S. A. Teukolsky, W. T. Vetterling, and B. P. Flannery, *Numerical Recipes in C*, 2nd edition ed. (Cambridge University Press, New York, NY, 1992).
- [95] J. E. Gentle, *Random Number Generation and Monte Carlo Methods* (Springer, Berlin Heidelberg New York, 1998).
- [96] A. M. Ferrenberg and D. Landau, Phys. Rev. Lett. **69**, 3382 (1992).
- [97] S. Brandt, *Data Analysis* (Springer, Berlin Heidelberg New York, 1998).
- [98] S. Brandt, *Datenanalyse* (BI Bibliographisches Institut, Mannheim Wien Zürich, 1981).
- [99] B. Efron, *The Jackknife, the Bootstrap and Other Resampling Plans* (SIAM, Philadelphia, Pennsylvania, 1982).
- [100] B. A. Berg, Comp. Phys. Com. **69**, 7 (1992).
- [101] G. Prüßner, D. Loison, and K.-D. Schotte, submitted to Phys. Rev B, accessible at <http://www.physik.fu-berlin.de/~loison/articles/reference21.html> (2000).
- [102] M. Barber, in *Phase Transition and Critical Phenomena*, edited by C. Domb and J. Lebowitz (Academic Press, New York, 1983), Vol. 8.
- [103] D. J. Amit, *Field Theory, the Renormalization Group, and Critical Phenomena*, revised second edition ed. (World Scientific, Singapore, 1989).
- [104] M. Hasenbusch, *Habilitationsschrift: Monte Carlo Studies of the three dimensional Ising Model* (Preprint, HU-Berlin, Institut für Physik, 1999).
- [105] S. Wansleben and J. Zittartz, Nucl. Phys. B **B280 [FS 18]**, 108 (1987).
- [106] K. Binder, Z. Phys. B **43**, 119 (1981).
- [107] K. Binder, Phys. Rev. Lett. **43**, 693 (1981).
- [108] A. M. Ferrenberg and R. H. Swendsen, Phys. Rev. Lett. **61**, 2635 (1988).
- [109] A. M. Ferrenberg and R. H. Swendsen, Phys. Rev. Lett. **63**, 1195 (1989).
- [110] P. Hohenberg and B. Halperin, Rev. Mod. Phys. **49**, 435 (1977).
- [111] H. Janssen, B. Schaub, and B. Smittmann, Z. Phys. B **73**, 539 (1989).
- [112] B. Zheng, Int. J. Mod. Phys. **12**, 1419 (1998).
- [113] Z. Li, R. Ritschel, and B. Zheng, J. Phys. A: Math. Gen. **27**, L837 (1994).
- [114] Z. Li, L. Schülke, and B. Zheng, Phys. Rev. Lett. **74**, 3396 (1995).
- [115] B. Zheng, Phys. Lett. A **215**, 81 (1996).
- [116] B. Zheng, Phys. Rev. Lett. **77**, 679 (1996).
- [117] A. Jaster, J. Mainville, L. Schülke, and B. Zheng, cond-mat/9808131 (1998).
- [118] G. Prüßner, D. Loison, and K.-D. Schotte, accepted at Physica A (29.02.2000), accessible at <http://www.physik.fu-berlin.de/~loison/articles/reference17.html> (1999).

- [119] D. Ledue, D. Landau, and J. Teillet, Phys. Rev. B **51**, 12523 (1995).
- [120] D. Ledue, Phys. Rev. B **53**, 3312 (1996).
- [121] P. Olson, Phys. Rev. Lett. **75**, 2758 (1995).
- [122] P. Olson, Phys. Rev. Lett. **77**, 4850 (1996).
- [123] P. Olson, Phys. Rev. B **55**, 3585 (1997).
- [124] C. Holm and W. Janke, Phys. Rev. B **48**, 936 (1993).
- [125] K. Binder and D. Heermann, *Monte Carlo Simulation in Statistical Physics* (Springer, Berlin Heidelberg New York, 1997).
- [126] R. Guida and J. Zinn-Justin, cond-mat/9803240 (1998).
- [127] B. B. Mandelbrot, *The fractal geometry of nature* (Freeman, New York, 1983).
- [128] Y. Gefen, A. Aharony, and B. B. Mandelbrot, J. Phys. A: Math. Gen. **16**, 1267 (1983).
- [129] Y. Gefen, A. Aharony, Y. Shapir, and B. B. Mandelbrot, J. Phys. A: Math. Gen. **17**, 435 (1984).
- [130] Y. Gefen, A. Aharony, and B. B. Mandelbrot, J. Phys. A: Math. Gen. **17**, 1277 (1984).
- [131] B. Hu, Phys. Rev. Lett. **55**, 2316 (1985).
- [132] B. Lin and Z. R. Yang, J. Phys. A: Math. Gen. **19**, L49 (1986).
- [133] L. Hao and Z. R. Yang, J. Phys. A: Math. Gen. **20**, 1627 (1987).
- [134] Y.-K. Wu and B. Hu, Phys. Rev. A **35**, 1404 (1987).
- [135] D. Stoyan and H. Stoyan, *Fractals, Random Shapes and Point Fields* (John Wiley & Sons, Chichester, 1994).
- [136] K. J. Falconer, *Fraktale Geometrie* (Spektrum Akademischer Verlag, Heidelberg, Berlin, Oxford, 1993).
- [137] P. Monceau, M. Perreau, and F. Hébert, Phys. Rev. B **58**, 6386 (1998).
- [138] B. Bonnier, Y. Leroyer, and C. Meyers, J. Phys. (Paris) **48**, 553 (1987).
- [139] J. C. A. d'Auriac and R. Rammal, J. Phys. A: Math. Gen. **19**, L655 (1986).
- [140] B. Bonnier, Y. Leroyer, and C. Meyers, Phys. Rev. B **40**, 8961 (1989).
- [141] G. Bhanot, H. Neuberger, and J. A. Shapiro, Phys. Rev. Lett. **53**, 2277 (1984).
- [142] D. Huse, Phys. Rev. B **40**, 304 (1989).
- [143] K. Humayun and A. Bray, J. Phys. A **24**, 1915 (1991).
- [144] G. Bhanot, D. Duke, and R. Salvador, Phys. Lett. **165B**, 355 (1985).
- [145] J. C. L. Guillou and J. Zinn-Justin, J. Physique **48**, 19 (1987).

- [146] W. Koehler, J. App. Phys. **36**, 1078 (1965).
- [147] W. Koehler, J. Cable, M. Wilkinson, and E. Wollan, Phys. Rev **151**, 414 (1966).
- [148] T. Garel and P. Pfeuty, J. Phys. C: Solid State Phys. **9**, L245 (1976).
- [149] U. Schotte *et al.*, J. Phys.: Condens. Matter **6**, 10105 (1994).
- [150] N. Stüßer, U. Schotte, K. Schotte, and X. Hu, Physica B **213 & 214**, 164 (1995).
- [151] H. Weber *et al.*, Phys. Rev. B **54**, 15924 (1996).
- [152] T. Werner *et al.*, Sol. St. Com. **102**, 609 (1997).
- [153] J. Wosnitza *et al.*, J. Magn. Magn. Mater. **177-181**, 177 (1998).
- [154] A. E. Jacobs and T. Nikuni, J. Phys.: Condens. Matter **10**, 6405 (1998).
- [155] D. Jones, A. Love, and M. Moore, J. Phys. C: Solid State Phys. **9**, 743 (1976).
- [156] T. Mason, M. Collins, and B. Gaullin, J. Phys. C **20**, L945 (1987).
- [157] Y. Ajiro *et al.*, J. Phys. Soc. Japan **57**, 2648 (1988).
- [158] H. Kadowaki, S. Shapiro, T. Inami, and Y. Ajiro, J. Phys. Soc. Japan **57**, 2640 (1988).
- [159] B. Gaulin, T. Mason, M. Collins, and J. Larese, Phys. Rev. Lett. **62**, 1380 (1989).
- [160] T. Mason, B. Gaulin, and M. Collins, Phys. Rev. B **39**, 586 (1989).
- [161] T. Goto, T. Inami, and Y. Ajiro, J. Phys. Soc. Japan **59**, 2328 (1990).
- [162] J. Wang, D. Belanger, and B. Gaulin, Phys. Rev. Lett. **66**, 3195 (1991).
- [163] T. Mason *et al.*, J. Magn. Magn. Mater. **104-107**, 197 (1992).
- [164] R. Deutschmann *et al.*, Euro. Phys. Lett. **17**, 637 (1993).
- [165] H. Weber *et al.*, Inter. J. Modern Phys. B **9**, 1387 (1995).
- [166] M. Collins and P. O.A, Can. J. Phys. **75**, 605 (1997).
- [167] H. Kawamura, J. Phys. Soc. Japan **54**, 3220 (1985).
- [168] H. Kawamura, J. Phys. Soc. Japan **56**, 474 (1987).
- [169] H. Kawamura, J. Phys. Soc. Japan **61**, 1299 (1992).
- [170] M. Plumer and A. Mailhot, Phys. Rev. B **50**, 6854 (1994).
- [171] D. Loison and H. Diep, Phys. Rev. B **50**, 16453 (1994).
- [172] T. Bhattacharya, A. Billoire, R. Lacaze, and T. Jolicoeur, J. Phys. I (Paris) **4**, 181 (1994).
- [173] S. Antonenko, A.I. Sokolov, and V. Varnashev, Phys. Lett. A **201**, 161 (1995).
- [174] A. Patashinskii and V. Prokrovskii, *Fluctuation Theory of Phase Transitions* (Pergamon press, Oxford, 1979).

- [175] D. Loison and K.-D. Schotte, Euro. Phys. J. B **August**, unknown (1999).
- [176] P. Azaria, B. Delamotte, and T. Jolicoeur, Phys. Rev. Lett. **64**, 3175 (1990).
- [177] P. Azaria, B. Delamotte, and T. Jolicoeur, J. App. Phys. **69**, 6170 (1991).
- [178] P. Azaria, B. Delamotte, F. Delduc, and T. Jolicoeur, Nucl. Phys. B **408**, 485 (1993).
- [179] G. Zumbach, Nucl. Phys. B **413**, 771 (1994).
- [180] M. Tissier, D. Mouhanna, and B. Delamotte, cond-mat/9908352 1 (1999).
- [181] M. Creutz, Phys. Rev. D **36**, 515 (1987).
- [182] A. Billoire, R. Lacaze, and A. Morel, Nucl. Phys. B **370**, 773 (1992).
- [183] M. E. Fisher and A. N. Berker, Phys. Rev. B **26**, 2507 (1982).
- [184] V. Privman and M. E. Fisher, J. Stat. Phys. **33**, 385 (1983).
- [185] K. Binder, Rep. Phys. Prog. **50**, 783 (1987).
- [186] D. Loison and P. Simon, Phys. Rev. B **61**, (2000).
- [187] C. D. Denniston, via <http://www-thphys.physics.ox.ac.uk/users/ColinDenniston/thesis.ps.gz> (1997).
- [188] K. J. M. Moriarty, Phys. Rev. D **25**, 2185 (1982).
- [189] T. Hattori and H. Nakajima, Nuc. Phys. B (Proc. Suppl.) **26**, 635 (1992).
- [190] K. Kawasaki, in *Phase Transition and Critical Phenomena*, edited by C. Domb and J. Lebowitz (Academic Press, New York, 1983), Vol. 8.
- [191] M. Suzuki and R. Kubo, J. Phys. Soc. Japan **24**, 51 (1968).
- [192] R. J. Glauber, J. Math. Phys. **4**, 294 (1963).