4 Monte–Carlo–Simulation

Die Statistische Mechanik von Systemen im thermischen Gleichgewicht verlangt die Berechnung von Ensemble–Mittelwerten durch Summation/Integration über Felder $\Phi = \{\Phi_x\}$ mit sehr vielen lokalen Komponenten.

4.1 Das Modell

Wir betrachten hier ein Gittermodell in d Dimensionen, das sich zum Studium des Ferromagnetismus eignet. Die lokalen Variablen (*Spins*) seien komplexe Zahlen $\Phi_x \in C$, das kanonische Ensemble wird beschrieben durch

$$\begin{aligned} S[\Phi, h] &= \sum_x \Big[|\Phi_x|^2 + \lambda(|\Phi_x|^2 - 1)^2 \\ &\quad -\kappa \sum_{\mu=1}^{d} (\Phi_x^* \Phi_{x+\mu} + \Phi_{x+\mu}^* \Phi_x) \qquad (4.1) \\ &\quad -(h_x^* \Phi_x + h_x \Phi_x^*) \Big] \\ Z[h] &= \int D\Phi \, \exp\{-S[\Phi, h]\} \qquad (4.2) \\ \text{mit} \quad D\Phi &\equiv \prod_x d\Phi_x \end{aligned}$$

Es ist ein (zunächst ortsabhängiges) äußeres Magnetfeld $h_x \in C$ eingeführt. Die Kopplung von Nachbarspins ist durch $\kappa \in R$ parametrisiert, die lokale Gewichtung durch $\lambda \geq 0$.

Für $\lambda = 0$ enthält der Exponent das komplexe Feld nur linear und quadratisch, das Modell ist nur für $2d|\kappa| < 1$ definiert und geschlossen lösbar (**Gaußsches Modell**).

Im Grenzfall $\lambda \to \infty$ werden die Spins auf den Einheitskreis $|\Phi_x| = 1$ eingeschränkt, und man hat das viel diskutierte **XY–Modell**.

Der allgemeine Fall $\lambda > 0$ interpoliert zwischen diesen beiden Extremfällen.

4.2 Statistische Simulation

Ziel der statistischen Simulation ist es, eine Stichprobe von Feldern $\{\Phi^{(1)}, \Phi^{(2)}, ...\}$ mit Verteilung $\sim \exp\{-S[\Phi, h]\}$ zu erzeugen (*importance sampling*).

Wenn das gelungen ist, kann man Ensemble–Mittelwerte statistisch schätzen: für eine konfigurationsweise definierte Observable $A[\Phi]$ wird

$$\begin{aligned} \langle A \rangle &\equiv Z[h]^{-1} \int D\Phi \, A[\Phi] \exp\{-S[\Phi, h]\} \\ &\approx N^{-1} \sum_{n=1}^{N} A[\Phi^{(n)}] \equiv \overline{A[\Phi]} \qquad (4.3) \end{aligned}$$

Das Problem, den dabei auftretenden statistischen Fehler abzuschätzen, wird im nächsten Kapitel behandelt.

4.3 Markov–Kette

Eine direkte Konstruktion von Feldern mit der verlangten Verteilung

$$P[\Phi] \quad \sim \quad \exp\{-S[\Phi, h]\} \tag{4.4}$$

ist wegen der vielen verkoppelten Variablen nicht möglich, deshalb bildet man eine **Markov–Kette**

$$\Phi^{(1)} \to \Phi^{(2)} \to \ldots \to \Phi^{(N)} \tag{4.5}$$

Sie ist rekursiv durch **Übergangswahrscheinlichkeiten** $W[\Phi \to \Phi']$ definiert mit

$$W[\Phi \to \Phi'] \quad \geq \quad 0 \tag{4.6}$$

$$\int D\Phi' \, W[\Phi \to \Phi'] \quad = \quad 1 \tag{4.7}$$

$$\int D\Phi \, P[\Phi] \, W[\Phi \to \Phi'] \quad = \quad P[\Phi'] \tag{4.8}$$

Die beiden ersten Bedingungen sind nötig, damit $W[\Phi \to \Phi']$ eine normierte Wahrscheinlichkeitsverteilung in Φ' darstellt. Die dritte bedeutet, dass sich die Markov–Kette im **Gleichgewicht** mit der Sollverteilung $P[\Phi]$ befindet. In Anwendungen benutzt man stattdessen die stärkere Bedingung des **detaillierten Gleichgewichts**:

$$P[\Phi] \, W[\Phi \to \Phi'] \quad = \quad P[\Phi'] \, W[\Phi' \to \Phi] \tag{4.9}$$

Eine vierte Bedingung stellt sicher, dass der gesamte Konfigurationsraum für den Markov–Prozess erreichbar ist (**Ergodizität**): zu jedem Paar Φ und Φ' gibt es eine Schrittzahl n, so dass der Übergang mit endlicher Wahrscheinlichkeit gelingt:

$$W^n[\Phi \to \Phi'] \quad > \quad 0 \tag{4.10}$$

Die Mehrschritt–Wahrscheinlichkeiten sind dabei durch Faltung gegeben:

$$W^2[\Phi \to \Phi'] = \int D\Phi'' \, W[\Phi \to \Phi''] \, W[\Phi'' \to \Phi']$$

etc.
Wenn die Anfangskonfiguration $\Phi^{(1)}$ der Kette (4.5) der angestrebten Verteilung $P[\Phi^{(1)}]$ folgt, dann hat die *gesamte* Kette die Wahrscheinlichkeit

$$\mathcal{P}_N[\Phi^{(1)}, .., \Phi^{(N)}] \quad = \quad P[\Phi^{(1)}] \, W[\Phi^{(1)} \to \Phi^{(2)}] \cdots W[\Phi^{(N-1)} \to \Phi^{(N)}] \tag{4.11}$$

Jedes *einzelne* $\Phi^{(n)}$ in der Kette folgt dann wieder der Verteilung $P[..]$:

$$\int \prod_{k \neq n} D\Phi^{(k)} \, \mathcal{P}_N[\Phi^{(1)}, .., \Phi^{(N)}] \quad = \quad P[\Phi^{(n)}] \tag{4.12}$$

wie man durch schrittweise Anwendung von Normierungs– bzw. Gleichgewichtsbedingung sieht. Deshalb liefert die Markov–Kette einen Satz von Konfigurationen, mit denen man die Verteilung $P[..]$ simulieren kann.
Bei der Konstruktion von statistischen Algorithmen hilft es, wenn man sich klar macht, dass man eine *feste* Folge von zulässigen Markov–Schritten zu einem Gesamtschritt zusammenfassen kann, der ohne weiteres wieder die vier Bedingungen erfüllt. (Die Eigenschaft des *detaillierten* Gleichgewichts vererbt sich allerdings *nicht*).

4.4 Lokales Update

Es ist nicht leicht, global eine neue Konfiguration Φ' zu finden, die die genannten Bedingungen erfüllt. Deshalb zerlegt man die Aufgabe und nimmt sich vor, die einzelnen Variablen nacheinander zu ändern.
Die Variable Φ_x folgt, wenn alle anderen festgehalten werden, der **lokalen Verteilung**

$$p(\Phi_x) \sim \exp\{B_x^*\Phi_x + B_x\Phi_x^* - |\Phi_x|^2 - \lambda(|\Phi_x|^2 - 1)^2\} \qquad (4.13)$$

$$\text{mit} \quad B_x = h_x + \kappa \sum_{\mu=1}^{d} (\Phi_{x+\mu} + \Phi_{x-\mu}) \qquad (4.14)$$

Ein lokales Update kann mit der **Metropolis**–Methode konstruiert werden: man schlägt einen Übergang $\Phi_x \to \Phi'_x$ vor und akzeptiert ihn mit der Wahrscheinlichkeit

$$p_{acpt} = \begin{cases} 1 & p(\Phi'_x) \geq p(\Phi_x) \\ p(\Phi'_x)/p(\Phi_x) & p(\Phi'_x) < p(\Phi_x) \end{cases} \qquad (4.15)$$

Der Vorschlag muss nur die Symmetriebedingung

$$w_{trial}(\Phi_x \to \Phi'_x) = w_{trial}(\Phi'_x \to \Phi_x) \qquad (4.16)$$

erfüllen. Dieses Update wird formal beschrieben durch die Übergangswahrscheinlichkeit

$$\begin{aligned} w_{metro}(\Phi_x \to \Phi'_x) &= w_{trial}(\Phi_x \to \Phi'_x)\, p_{acpt}(\Phi_x, \Phi'_x) \\ &\quad + [1 - A(\Phi_x)]\, \delta(\Phi_x, \Phi'_x) \qquad (4.17) \\ \text{mit} \quad p_{acpt}(\Phi_x, \Phi'_x) &= \min\{1, p(\Phi'_x)/p(\Phi_x)\} \qquad (4.18) \\ A(\Phi_x) &= \int d\Phi'_x\, w_{trial}(\Phi_x \to \Phi'_x)\, p_{acpt}(\Phi_x, \Phi'_x) \qquad (4.19) \end{aligned}$$

Wenn in diesem Metropolis–Schritt keine neue Variable akzeptiert wird, bleibt die alte stehen, und die Wahrscheinlichkeit dafür, nämlich $[1 - A(\Phi_x)]$, ist durch die Normierung

$$\int d\Phi'_x w_{metro}(\Phi_x \to \Phi'_x) = 1 \qquad (4.20)$$

bestimmt. $A(\Phi_x)$, die **Akzeptanz**, ist demnach die Wahrscheinlichkeit dafür, dass die lokale Variable neu gesetzt wird.
Der Metropolis–Schritt (4.16)-(4.18) erfüllt die Bedingung des detaillierten Gleichgewichts (4.9), denn

$$\begin{aligned} p(\Phi_x) w_{metro}(\Phi_x \to \Phi'_x) &= w_{trial}(\Phi_x \to \Phi'_x)\, p(\Phi_x)\, p_{acpt}(\Phi_x, \Phi'_x) \\ &+ p(\Phi_x)\, [1 - A(\Phi_x)]\, \delta(\Phi_x, \Phi'_x) \end{aligned}$$

ist invariant gegenüber $\Phi_x \leftrightarrow \Phi'_x$ wegen

$$\begin{aligned} p(\Phi_x)\, p_{acpt}(\Phi_x, \Phi'_x) &= \min\{p(\Phi_x), p(\Phi'_x)\} \\ &= p(\Phi'_x)\, p_{acpt}(\Phi'_x, \Phi_x) \end{aligned} \tag{4.21}$$

Der Metropolis–Schritt ist also (lokal) korrekt, wenn der Vorschlag symmetrisch ist und die Akzeptanz–Wahrscheinlichkeit im detaillierten Gleichgewicht mit der lokalen Verteilung steht. Darüber hinaus ist nur noch die Ergodizität zu prüfen: jede vorgegebene Konfiguration muss in endlich vielen Metropolis–Schritten erreichbar sein.

4.5 Implementierung der Iteration $\Phi \to \Phi'$

Im vorliegenden Modell kann der lokale Metropolis–Vorschlag so aussehen:

$$\begin{aligned} \Phi'_x &= \Phi_x + r_1 + ir_2 \qquad (4.22) \\ \text{mit} \quad r_{1,2} &= \text{random}[-\delta, \delta] \end{aligned}$$

Der Parameter δ ist im Prinzip frei wählbar, aber wenn man den Schritt sehr klein nimmt, wird er zwar meistens akzeptiert, aber das Update kriecht langsam durch den Konfigurationsraum. Bei sehr großem δ wiederum wird der Vorschlag meistens abgelehnt, und die Variable bewegt sich zu selten. Erfahrung und systematische Tests zeigen, dass δ dann optimal gewählt wurde, wenn sich eine Akzeptanz von 30..50% *pro Vorschlag* ergibt.
Da B_x schon berechnet wurde und sich bei einem Metropolis–Schritt auch nicht ändert, kann man es für **dasselbe** Φ_x gleich **mehrfach** versuchen. Üblich sind 10 Versuche (*hits*) pro Punkt (unabhängig davon, wie oft akzeptiert wird!). Bei 40% Akzeptanz pro hit wird dann mit großer Wahrscheinlichkeit

$$1 - (1 - 0.4)^{10} = 0.994 = 99.4\%$$

eine neue Variable gefunden. Selbst mit 6 hits liegt man schon über 95%.
Eine Iteration über alle Punkte (*sweep*) erzeugt dann eine neue Konfiguration Φ' in der Markov–Kette. Auf ihr wird man dann Observablen "messen" und für die Mittelung akkumulieren.
Da die optimale lokale Schrittweite δ von den Parametern des Systems abhängt, müsste man sie häufig neu bestimmen. Bequemer ist es, diesen

Schritt zu automatisieren: man beobachtet die Akzeptanz A, gemittelt über alle *hits* einer Iteration des gesamten Feldes, und wenn sie zu weit vom Optimum entfernt ist, passt man δ *vorsichtig* an, z.B.

$$\delta \quad \to \quad \begin{cases} 0.95 \times \delta & \text{wenn} \quad A < .35 \\ 1.05 \times \delta & \text{wenn} \quad A > .45 \end{cases} \tag{4.23}$$

Warnung: diese Manipulation darf man nur in der Anlaufphase der Simulation (*Thermalisierung*) vornehmen. Während der Berechnung von Mittelwerten (*Messung*) muss die gesamte Markov–Konstruktion (δ, Hits/Punkt, Durchlaufordnung der Punkte) unangetastet bleiben, sonst kann die Gleichgewichtsbedingung verletzt werden, und die Analyse des statistischen Fehlers wird auch ungültig.

4.6 Observablen

In einem homogenen äußeren Magnetfeld ($h_x = h = \text{const}$) und mit periodischen Randbedingungen ist das System translationsinvariant, und man diskutiert die Physik des Systems anhand der folgenden Observablen.

4.6.1 Magnetisierung

Sie ist konfigurationsweise und im thermodynamischen Mittel definiert als

$$M[\Phi] = V^{-1} \sum_x \Phi_x \tag{4.24}$$

$$M(h) = \Big\langle M[\Phi] \Big\rangle_h \tag{4.25}$$

$$= V^{-1} \frac{\partial}{\partial h^*} \log Z(h) \tag{4.26}$$

4.6.2 Suszeptibilität

Sie ist gegeben als

$$\begin{aligned} \chi &= \frac{\partial}{\partial h} M(h) \\ &= V^{-1} \frac{\partial^2}{\partial h \partial h^*} \log Z(h) \\ &= V^{-1} \sum_{xy} \Big[\Big\langle \Phi_x \Phi_y^* \Big\rangle_h - \Big\langle \Phi_x \Big\rangle_h \Big\langle \Phi_y^* \Big\rangle_h \Big] \end{aligned} \tag{4.27}$$

und stellt sich als Varianz der (konfigurationsweise gemessenen) Magnetisierung dar:

$$\begin{aligned} \chi &= V \Big[\Big\langle M[\Phi] M[\Phi]^* \Big\rangle_h - \Big\langle M[\Phi] \Big\rangle_h \Big\langle M[\Phi]^* \Big\rangle_h \Big] \\ &= V \Big[\langle |M[\Phi]|^2 \rangle_h - |\langle M[\Phi] \rangle_h|^2 \Big] \end{aligned} \tag{4.28}$$

Die Suszeptibilität selber lässt sich *nicht* konfigurationsweise angeben.

4.6.3 Korrelationsfunktion

$$\Gamma(x-y) = \langle \Phi_x \Phi_y^* \rangle_h - \langle \Phi_x \rangle_h \langle \Phi_y^* \rangle_h \tag{4.29}$$

Wegen der Translationsinvarianz hängt die Korrelationsfunktion Γ nur von $x - y$ ab, und Summation über alle Abstände führt zur Suszeptibilität:

$$\begin{aligned} \chi &= V^{-1} \sum_{xy} \Gamma(x-y) \\ &= \sum_x \Gamma(x) \end{aligned} \tag{4.30}$$

4.6.4 Spontane Symmetriebrechung

Bei verschwindendem äußeren Magnetfeld ist sowohl der Boltzmann–Faktor als auch das Integrationsmaß der Zustandssumme invariant unter einer *globalen* Phasendrehung der Spins:

$$\Phi_x \quad \to \quad e^{i\alpha}\Phi_x \tag{4.31}$$

Deshalb können sich die Spins um einen gemeinsamen Phasenfaktor frei drehen, und nicht-invariante Observable verschwinden im Mittel:

$$\begin{aligned} \langle \Phi_x \rangle &= 0 \\ \Rightarrow \quad M(h=0) &\stackrel{?}{=} 0 \end{aligned}$$

Andererseits ist eine **ferromagnetische Phase** gerade durch eine spontane Magnetisierung

$$M_0 \quad \equiv \quad M(h=0) \neq 0 \tag{4.32}$$

charakterisiert. *Wie verträgt sich das?*
Die Antwort ergibt sich, wenn man die Systemgröße berücksichtigt: in einem *kleinen* System mittelt sich die Magnetisierung tatsächlich schnell weg. In einem *großen* System müssen sich dazu viele Spins gemeinsam bewegen, und das kann sehr lange dauern (Metastabilität). Bei *unendlich* vielen Spins hält eine anfängliche Ordnung der Spins tatsächlich dauerhaft an.
Um klare Verhältnisse zu schaffen, kann man das System erstmal mit einem homogenen Magnetfeld $h \neq 0$ global ordnen und dann das Feld abschalten. Man hat dann einerseits

$$M(h=0) \quad = \quad 0 \qquad V < \infty \tag{4.33}$$

und bei Ferromagnetismus andererseits

$$M_0 \quad = \quad \lim_{h\to 0} \lim_{V\to\infty} M(h) \neq 0 \tag{4.34}$$

Die Grenzwerte vertauschen also *nicht*. Die Orientierung von M_0 stammt übrigens von dem (inzwischen abgeschalteten) äußeren Feld.

4.6.5 Ordnungsparameter im MC

Um mit MC–Simulationen nach möglichen ferromagnetischen Phasen zu suchen, muss man die Observablen sorgfältig wählen, weil ein simuliertes System immer endlich ist. Simulationen mit kleinem h (zur Extrapolation $h \to 0$) sind auf großen Systemen wegen ihrer Nähe zur symmetrischen Situation heikel, deshalb möchte man alle Simulationen gleich mit $h = 0$ durchführen. Dann aber sollte man nur Mittelwerte von invarianten Größen betrachten (andere verschwinden mehr oder weniger schnell). Am ehesten hat man Erfolg mit invarianten Momenten, deren Mittelwerte man bei wachsendem Volumen beobachtet:

$$\langle |M|^2 \rangle \quad \to \quad \begin{cases} 0 & \text{paramagnetisch} \\ |M_0|^2 & \text{ferromagnetisch} \end{cases} \qquad \text{für} \quad V \to \infty \tag{4.35}$$

und die als **Binder**–Parameter (auch: Binder–Kumulante) bekannte Kombination

$$U_4 \quad = \quad 2 - \frac{\langle |M|^4 \rangle}{\langle |M|^2 \rangle^2} \tag{4.36}$$

$$\to \quad \begin{cases} 0 & \text{paramagnetisch} \\ 1 & \text{ferromagnetisch} \end{cases} \qquad \text{für} \quad V \to \infty \tag{4.37}$$

(Bezeichnung und Normierung variiert.)
Eine genauere Diskussion der Ordnungsparameter in den verschiedenen Phasen folgt (mit etwas mehr theoretischem Hintergrund) am Ende dieses Kapitels.

4.7 Meanfield-Näherung

Wir nehmen ein räumlich konstantes Magnetfeld h an und betrachten die zugehörige Magnetisierung M:

$$\begin{aligned} h_x &= h \\ M &= \langle \Phi_x \rangle \end{aligned}$$

Die lokale Variable Φ_x steht unter dem Einfluss des äußeren Feldes h und der Nachbarspins in der Kombination

$$B_x = h + \kappa \sum_{\mu=1}^{d} [\Phi_{x+\mu} + \Phi_{x-\mu}] \tag{4.38}$$

Nun ersetzen wir (*grob vereinfachend*) die Nachbarspins durch ihren Mittelwert $\langle \Phi_x \rangle = M$ und erhalten so eine selbstkonsistente Gleichung für die Magnetisierung M:

$$M = \frac{\int d^2\phi\, \phi \exp\{B^*\phi + \phi^* B - V_\lambda(\phi)\}}{\int d^2\phi\, \exp\{B^*\phi + \phi^* B - V_\lambda(\phi)\}} \tag{4.39}$$

$$\text{mit} \quad B = h + 2d\kappa M \tag{4.40}$$

$$V_\lambda(\phi) = |\phi|^2 + \lambda(|\phi|^2 - 1)^2 \tag{4.41}$$

Im folgenden sollen Mittelwerte bezüglich des Maßes

$$d^2\phi\, e^{-V_\lambda(\phi)} \tag{4.42}$$

mit $\langle ... \rangle_\lambda$ bezeichnet werden. Die *Meanfield–Gleichung* (4.39) lautet dann einfach

$$M = \frac{\Big\langle \phi \exp\{B^*\phi + \phi^* B\} \Big\rangle_\lambda}{\Big\langle \exp\{B^*\phi + \phi^* B\} \Big\rangle_\lambda} \tag{4.43}$$

$$= \frac{\partial}{\partial B^*} \log \Big\langle \exp\{B^*\phi + \phi^* B\} \Big\rangle_\lambda \tag{4.44}$$

Zur weiteren Analyse entwickeln wir die rechte Seite für kleine B: wegen der Phaseninvarianz von $V_\lambda(\phi)$ ist

$$\begin{aligned} \langle (\phi^*)^m \phi^n \rangle_\lambda &= \delta_{mn} \langle |\phi|^{2n} \rangle_\lambda \\ \Rightarrow \quad \Big\langle \exp\{B^*\phi + \phi^* B\} \Big\rangle_\lambda &= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{|B|^{2n}}{n!^2} \Big\langle |\phi|^{2n} \Big\rangle_\lambda \\ \Rightarrow \quad \log \Big\langle \exp\{B^*\phi + \phi^* B\} \Big\rangle_\lambda &= |B|^2 \langle |\phi|^2 \rangle_\lambda + \frac{1}{4} |B|^4 \left(\langle |\phi|^4 \rangle_\lambda - 2 \langle |\phi|^2 \rangle_\lambda^2 \right) \\ &\quad + \mathcal{O}(|B|^6) \\ &= |B|^2 \langle |\phi|^2 \rangle_\lambda - \frac{c_\lambda}{4} |B|^4 + \mathcal{O}(|B|^6) \end{aligned} \tag{4.45}$$

$$\text{mit} \quad c_\lambda = 2 \langle |\phi|^2 \rangle_\lambda^2 - \langle |\phi|^4 \rangle_\lambda \; \geq \; 0 \tag{4.46}$$

$$\Rightarrow \quad M = B \left\{ \langle |\phi|^2 \rangle_\lambda - \frac{c_\lambda}{2} |B|^2 + \mathcal{O}(|B|^4) \right\} \tag{4.47}$$

Bei $h = 0$ gibt es für die Magnetisierung immer die triviale Lösung $M = 0$. Eine **spontane Magnetisierung** $M_0 \neq 0$ verlangt offenbar

$$2d\kappa\langle|\phi|^2\rangle_\lambda > 1.$$

Bei festem λ ist also der **kritische Punkt** *(Curie-Punkt)* $\kappa = \kappa_c$ in der Meanfield–Näherung gegeben durch

$$2d\kappa_c\langle|\phi|^2\rangle_\lambda = 1. \tag{4.48}$$

Zur numerischen Auswertung lassen sich die Momente $\langle|\phi|^{2n}\rangle_\lambda$ mit etwas Geduld durch eine Fehlerfunktion (*error function complement*) ausdrücken [s. Anh. F]:

$$\begin{aligned}
\mathrm{erfc}(z) &\equiv \frac{2}{\sqrt{\pi}}\int_z^\infty dt\, e^{-t^2} && (4.49)\\
\langle|\phi|^2\rangle_\lambda &= \frac{1}{\sqrt{\lambda}}\left\{\frac{e^{-z^2}}{\sqrt{\pi}\,\mathrm{erfc}(z)} - z\right\} && (4.50)\\
\langle|\phi|^4\rangle_\lambda &= \frac{1}{\lambda}\left\{\frac{1}{2} + z^2 - \frac{ze^{-z^2}}{\sqrt{\pi}\,\mathrm{erfc}(z)}\right\} && (4.51)\\
\text{mit}\quad z &\equiv 1/(2\sqrt{\lambda}) - \sqrt{\lambda}
\end{aligned}$$

So erhält man das **Phasendiagramm** in Abb. 2.

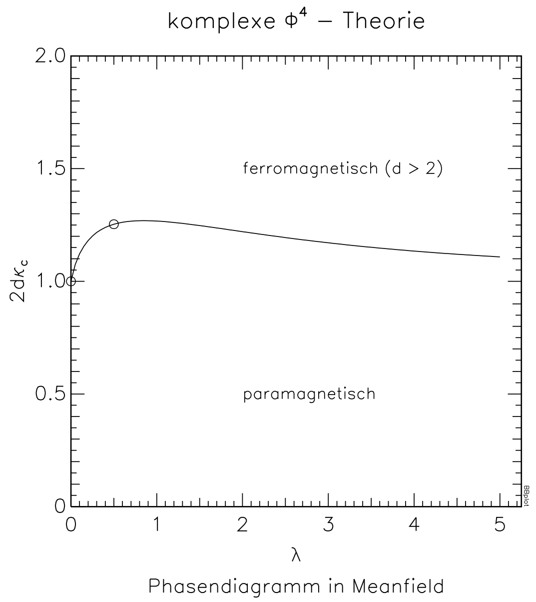

Abbildung 2: Phasendiagramm nach Glg.(4.48).

Nähert man sich dem Curiepunkt von der **ferromagnetischen** Seite her ($\kappa \gtrsim \kappa_c$), dann ergibt sich für die **spontane Magnetisierung** M_0 aus (4.47) mit $h = 0$:

$$\begin{aligned} M_0 &\simeq 2d\kappa M_0 \left\{ \langle|\phi|^2\rangle_\lambda - \frac{c_\lambda}{2}|2d\kappa M_0|^2 \right\} \\ \Rightarrow \quad \frac{c_\lambda}{2}(2d\kappa)^3|M_0|^2 &\simeq \frac{\kappa}{\kappa_c} - 1 \\ \Rightarrow \quad |M_0| &\sim (\kappa - \kappa_c)^\beta \qquad \kappa \gtrsim \kappa_c \qquad (4.52) \\ \text{mit} \quad \beta &= 1/2 \qquad (4.53) \end{aligned}$$

In der **paramagnetischen** Phase ohne äußeres Magnetfeld gibt die Meanfield–Näherung ein einfaches Resultat für die **Suszeptibilität**: man wendet $\partial/\partial h$ auf Glg.(4.47) an, lässt $h \to 0$ und erhält

$$\begin{aligned} \chi &= (1 + 2d\kappa\chi)\langle|\phi|^2\rangle_\lambda = \frac{1 + 2d\kappa\chi}{2d\kappa_c} \\ \Rightarrow \quad \chi &= \frac{1}{2d(\kappa_c - \kappa)} \qquad (4.54) \\ &\sim (\kappa_c - \kappa)^{-\gamma} \qquad \kappa < \kappa_c \qquad (4.55) \\ \text{mit} \quad \gamma &= 1 \qquad (4.56) \end{aligned}$$

Die Suszeptibilität divergiert also bei Annäherung an den kritischen Punkt. Für die **Magnetisierung am Curiepunkt** wertet man (4.47) mit $B = h + 2d\kappa_c M$ aus:

$$\begin{aligned} M &\simeq h\langle|\phi|^2\rangle_\lambda + M - \frac{c_\lambda}{2}B|B|^2 \\ \Rightarrow \quad \frac{c_\lambda}{2}(2d\kappa_c)^4 M|M|^2 &\simeq h \\ \Rightarrow \quad |M| &\sim |h|^{1/\delta} \qquad \kappa = \kappa_c \qquad (4.57) \\ \text{mit} \quad \delta &= 3 \qquad (4.58) \end{aligned}$$

Am Curiepunkt verschwindet die Magnetisierung also mit einer gebrochenen Potenz des äußeren Magnetfelds.
Die in Meanfield–Näherung berechneten Phasendiagramme und *kritischen Exponenten* wie β, γ, δ sind für hohe Dimensionen korrekt, in niedrigen Dimensionen gibt es mehr oder weniger große Abweichungen, teilweise sind die Voraussagen sogar qualitativ falsch.
Abb. 3 zeigt numerische Lösungen der Meanfield–Gleichungen (4.40), (4.43) für $M(h)$ und $M_0(\kappa)$ im Grenzfall des XY–Modells ($\lambda = \infty$) [s. Anh. F].

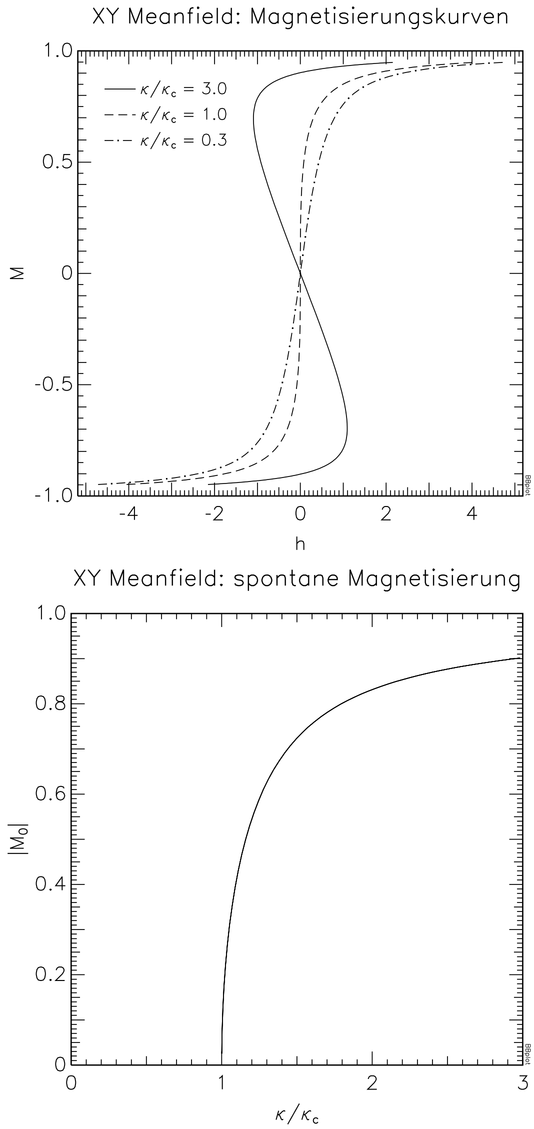

Abbildung 3: Magnetisierung des XY–Modells in Meanfield–Näherung.

4.8 Feldgleichungen

Variablentransformation in der Zustandssumme:

$$\begin{aligned} \Phi &\to \Phi' \\ \Rightarrow \quad \int D\Phi e^{-S[\Phi,h]} &= \int D\Phi'\, e^{-S[\Phi',h]} \\ &= \int D\Phi\, J[\Phi]\, e^{-S[\Phi',h]} \end{aligned}$$

Meist ist die *Jacobi–Determinante* $J[\Phi] = 1$ (nachprüfen!), dann folgt für eine *infinitesimale* Transformation

$$\begin{aligned} \Phi_x &\to \Phi_x + \delta\Phi_x \\ \Phi_x^* &\to \Phi_x^* + \delta\Phi_x^* \\ S[\Phi + \delta\Phi, h] &= S[\Phi, h] + \delta S[\Phi, h] \\ \Rightarrow \quad \int D\Phi\, \delta S[\Phi, h]\, e^{-S[\Phi,h]} &= 0 \end{aligned} \tag{4.59}$$

Speziell für eine infinitesimale Verschiebung der Felder Φ_x^*:

$$\begin{aligned} \delta\Phi_x &= 0 \\ \delta\Phi_x^* &= \epsilon_x^* \\ \Rightarrow \quad J[\Phi] &= 1 \\ S[\Phi, h] &= V[\Phi] - \kappa \sum_{x,\mu} (\Phi_x^* \Phi_{x+\mu} + \Phi_{x+\mu}^* \Phi_x) - \sum_x (h_x^* \Phi_x + h_x \Phi_x^*) \\ V[\Phi] &= \sum_x \left[|\Phi_x|^2 + \lambda(|\Phi_x|^2 - 1)^2 \right] \\ \Rightarrow \quad \delta S[\Phi, h] &= -\kappa \sum_{x,\mu} \epsilon_x^* (\Phi_{x+\mu} + \Phi_{x-\mu}) + \sum_x \epsilon_x^* \frac{\partial V}{\partial \Phi_x^*} - \sum_x \epsilon_x^* h_x \end{aligned}$$

Einsetzen und Division durch $Z[h]$:

$$-\kappa \sum_{\mu=1}^{d} \langle \Phi_{x+\mu} + \Phi_{x-\mu} \rangle_h + \left\langle \frac{\partial V}{\partial \Phi_x^*} \right\rangle_h = h_x \tag{4.60}$$

$$\text{mit} \quad \frac{\partial V}{\partial \Phi_x^*} = \Phi_x + 2\lambda(|\Phi_x|^2 - 1)\, \Phi_x \tag{4.61}$$

Diese Gleichung ist, weil sie für beliebiges Magnetfeld h_x hergeleitet wurde, ein Ausgangspunkt für weitergehende Schlüsse.
Anwenden von $\frac{\partial}{\partial h_y}$:

$$\Rightarrow \quad -\kappa \sum_{\mu=1}^{d} \langle (\Phi_{x+\mu} + \Phi_{x-\mu}) \Phi_y^* \rangle_h^c + \left\langle \frac{\partial V}{\partial \Phi_x^*} \Phi_y^* \right\rangle_h^c = \delta_{xy} \tag{4.62}$$

Der Index c beim Mittelwert bezeichnet dabei den "verbundenen" Anteil (*connected, cumulant, correlation*)

$$\langle AB\rangle^c \quad\equiv\quad \langle AB\rangle - \langle A\rangle\langle B\rangle \tag{4.63}$$

Der Abzug kommt hier zustande, weil auch $Z[h]$ im Nenner der Mittelwerte in (4.61) differenziert werden muss.
Bei $h_x = h = const$ ist (4.62) (fast) eine Differentialgleichung für die Korrelationsfunktion $\Gamma(x-y)$ (4.29):

$$\begin{aligned}
&\Gamma(x-y) &=& \langle\Phi_x\Phi_y^*\rangle_h^c \\
\Rightarrow\quad &\Delta\Gamma(x-y) &=& \sum_{\mu=1}^{4}\langle(\Phi_{x+\mu}+\Phi_{x-\mu})\Phi_y^*\rangle_h^c - 2d\langle\Phi_x\Phi_y^*\rangle_h^c \\
\Rightarrow\quad &-\kappa\Delta\Gamma(x-y) &+& (1-2d\kappa-2\lambda)\Gamma(x-y) \;+\; 2\lambda\langle(|\Phi_x|^2\Phi_x)\Phi_y^*\rangle_h^c \;=\; \delta_{xy}
\end{aligned} \tag{4.64}$$

Ohne den Term $\langle(|\Phi_x|^2\Phi_x)\Phi_y^*\rangle_h^c$ wäre das eine Greensfunktionsgleichung, aus der man die Korrelationsfunktion direkt berechnen könnte.

4.9 Kontinuierliche Symmetrie

Ohne äußeres Magnetfeld hat die Wirkung eine **kontinuierliche, globale Symmetrie**: $S[\Phi, h=0]$ ist invariant unter der Phasentransformation

$$\begin{aligned}
\Phi_x &\to e^{i\alpha}\Phi_x \\
\Phi_x^* &\to e^{-i\alpha}\Phi_x^*
\end{aligned}$$

und auch das Integrationsmaß ist invariant (Jacobi-Determinante $J[\Phi]=1$).
Um die Konsequenzen dieser Symmetrie zu diskutieren, betrachten wir die entsprechende *lokale, infinitesimale* Transformation:

$$\begin{aligned}
&\delta\Phi_x &=& \; i\delta\alpha_x\Phi_x \\
&\delta\Phi_x^* &=& \; -i\delta\alpha_x\Phi_x^* \\
\Rightarrow\quad &\delta S[\Phi,h] &=& \; \kappa\sum_{x,\mu} i\delta\alpha_x(\Phi_x^*\Phi_{x+\mu} - \Phi_{x-\mu}^*\Phi_x + \Phi_x^*\Phi_{x-\mu} - \Phi_{x+\mu}^*\Phi_x) \\
& & & \; -\sum_x i\delta\alpha_x(h_x^*\Phi_x - h_x\Phi_x^*)
\end{aligned}$$

Hierbei ist $V[\Phi]$ immer noch invariant und auch $J[\Phi]=1$.
Notation und Nebenrechnung:

$$\begin{aligned}
(\partial_\mu\Phi)_x &= \Phi_{x+\mu} - \Phi_x \\
(\bar\partial_\mu\Phi)_x &= \Phi_x - \Phi_{x-\mu} \\
\overleftrightarrow{\partial}_\mu &= \partial_\mu - \overleftarrow{\partial}_\mu
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
j_{x\mu} &= i(\Phi_x^* \overleftrightarrow{\partial}_\mu \Phi_x) && (4.65)\\
&= i(\Phi_x^*\Phi_{x+\mu} - \Phi_{x+\mu}^*\Phi_x) && (4.66)\\
\Rightarrow \quad \bar\partial_\mu j_{x\mu} &= i(\Phi_x^*\Phi_{x+\mu} - \Phi_{x+\mu}^*\Phi_x - \Phi_{x-\mu}^*\Phi_x + \Phi_x^*\Phi_{x-\mu})\\
\Rightarrow \quad \delta S[\Phi,h] &= \sum_x \delta\alpha_x \left[\kappa \sum_\mu \bar\partial_\mu j_{x\mu} - i(h_x^*\Phi_x - h_x\Phi_x^*)\right]
\end{aligned}$$

$j_{x\mu}$ ist der zur Phaseninvarianz der Spins gehörige **Noether–Strom**.

$$\Rightarrow \quad \kappa \sum_\mu \bar\partial_\mu \langle j_{x\mu}\rangle_h = i h_x^* \langle\Phi_x\rangle_h - i h_x \langle\Phi_x^*\rangle_h \tag{4.67}$$

Dies ist die Schlüsselrelation für die Konsequenzen der Phasensymmetrie.

$$\begin{aligned}
\frac{\partial}{\partial h_y^*} \Rightarrow \quad \kappa \sum_\mu \bar\partial_\mu^{(x)} \langle j_{x\mu}\Phi_y\rangle_h^c &= i\delta_{xy}\langle\Phi_x\rangle_h\\
&+ \; i h_x^*\langle\Phi_x\Phi_y\rangle_h^c - i h_x \langle\Phi_x^*\Phi_y\rangle_h^c\\
h=0 \Rightarrow \quad \kappa \sum_\mu \bar\partial_\mu^{(x)} \langle j_{x\mu}\Phi_y\rangle_{h=0}^c &= i\delta_{xy}\langle\Phi_x\rangle_{h=0} && (4.68)
\end{aligned}$$

Im unendlichen Volumen ist eine ferromagnetische Phase gekennzeichnet durch eine permanente Magnetisierung, die auch bei abgeschaltetem Feld zurückbleibt:

$$\langle\Phi_x\rangle_{h=0} = M_0 \neq 0 \tag{4.69}$$

Dadurch wird willkürlich eine globale Phasenrichtung der Spins ausgezeichnet, d.h. es liegt **spontane Symmetriebrechung** vor.

$$\Rightarrow \quad \kappa \sum_\mu \bar\partial_\mu^{(x)} \langle j_{x\mu}\Phi_y\rangle_{h=0}^c = i\delta_{xy} M_0 \tag{4.70}$$

Diese Korrelationsfunktion $\langle j_{x\mu}\Phi_y\rangle_{h=0}^c$ muss sich also bei $p \to 0$ wie $|p|^{-1}$ verhalten, deshalb wird sie im Ortsraum nicht exponentiell abfallen, sondern $\sim r^{1-d}$. Es gibt also **langreichweitige** (*masselose*) Korrelationen im System als Folge der spontanen Symmetriebrechung, und die Spinvariable Φ_x koppelt daran. Das ist die Aussage des **Goldstone**–Theorems.
Die Spin–Spin–Korrelation $\langle\Phi_x\Phi_y^*\rangle$ selber wird sich dann bei großen Abständen (kleinen Impulsen) wie ein freies Skalarfeld verhalten: $\sim |x-y|^{2-d}$ bzw. $\sim |p|^{-2}$ – das ist der Goldstone–Mode.

4.10 Grenzfall $d = 2$

Ein Goldstone–Mode hat eine Korrelationsfunktion, die bei großen Abständen $\sim r^{2-d}$ abfällt, entsprechend einem Verhalten $\sim 1/k^2$ im Impulsraum (also wie $(-\Delta)^{-1}$). In $d \leq 2$ Dimension ist das nicht möglich, weil dort $1/k^2$ nicht integrabel ist (auch nicht als Distribution). Deshalb ist der Goldstone–Mechanismus in 2 Dimensionen und darunter nicht möglich (**Coleman–Theorem**, 1973). In denselben Fällen kann man zeigen, dass beim Abschalten eines (konstanten) äußeren Magnetfelds die Magnetisierung verschwindet (**Mermin–Wagner–Theorem**, 1966).
Unser komplexes Spinmodell kann also in 2 Dimensionen keine ferromagnetische Phase haben – im Gegensatz zum Meanfield–Resultat! Anstelle eines formalen Beweises (schwierig) soll das hier in der *Spinwellen*–Näherung vorgerechnet werden (Wegner, 1967). Dazu nehmen wir (der Einfachheit halber) den Grenzfall $\lambda = \infty$, wo $|\Phi_x| = 1$ (XY–Modell), und koppeln an ein konstantes Magnetfeld $h > 0$. Wir parametrisieren die Spins mit Phasenwinkeln φ_x und schreiben damit die Wirkung auf:

$$\begin{aligned}
\Phi_x &= e^{i\varphi_x} \\
S[\Phi, h] &= -2\kappa \sum_{x,\mu} \cos(\varphi_{x+\mu} - \varphi_x) - 2h \sum_x \cos\varphi_x
\end{aligned} \tag{4.71}$$

Im XY–Modell steht normalerweise $\kappa_{XY} = 2\kappa$ und $h_{XY} = 2h$.

4.10.1 Magnetisierung bei $h \to 0$

$$\begin{aligned}
M(h) &= \langle e^{i\varphi_x} \rangle_h \\
&= \int D\varphi \, e^{i\varphi_x} e^{-S[\Phi,h]}/Z[h]
\end{aligned} \tag{4.72}$$

Im Grenzfall $\kappa \gg 1$ stellt man sich nun vor, dass das Integral durch kleine Fluktuationen in $\{\varphi_x\}$ (sog. **Spinwellen**) dominiert ist, und ersetzt die Wirkung durch ihre quadratische Näherung um $\varphi_x = 0$:

$$S[\Phi, h] \approx 2\kappa \sum_{x,\mu} \frac{1}{2}(\varphi_{x+\mu} - \varphi_x)^2 + 2h \sum_x \frac{1}{2}\varphi_x^2 + \text{const} \tag{4.73}$$

$$= \kappa \sum_x \varphi_x(-\Delta + m^2)\varphi_x + \text{const} \tag{4.74}$$

$$\text{mit} \quad m^2 = h/\kappa \tag{4.75}$$

Formal werden die Winkelintegrationen auf $\int_{-\infty}^{\infty}$ ausgedehnt, so dass ein vieldimensionales Gauß–Integral entsteht. Schreiben wir noch

$$\begin{aligned}
e^{i\varphi_x} &= e^{i\sum_z s_z\varphi_z} \equiv e^{is\cdot\varphi} \\
\text{mit} \quad s_z &= \delta_{xz}
\end{aligned}$$

dann lässt sich die Magnetisierung durch quadratische Ergänzung ausrechnen:

$$\begin{aligned} M(h) &= \frac{\int D\varphi\, \exp\{i\, s\cdot\varphi - \kappa\,\varphi\cdot(-\Delta+m^2)\varphi\}}{\int D\varphi\, \exp\{-\kappa\,\varphi\cdot(-\Delta+m^2)\varphi\}} \\ &= \exp\left\{-\frac{1}{4\kappa}\, s\cdot(-\Delta+m^2)^{-1}s\right\} \\ &= \exp\left\{-\frac{1}{4\kappa}\, G(0;m)\right\} \end{aligned} \tag{4.76}$$

Dabei ist

$$G(x-y;m) = \int \frac{d^dp}{(2\pi)^d}\, \frac{e^{ip\cdot(x-y)}}{\sum_\mu 2(1-\cos p_\mu)+m^2} \tag{4.77}$$

der skalare, massive *Gitterpropagator*, d.h. das Inverse von $(-\Delta+m^2)$ im Ortsraum. Wir brauchen davon zunächst nur

$$G(0;m) = \int \frac{d^dp}{(2\pi)^d}\, \frac{1}{\sum_\mu 2(1-\cos p_\mu)+m^2} \tag{4.78}$$

im Grenzfall $h\to 0$, d.h. $m\to 0$. In $d>2$ Dimensionen ist das einfach eine numerische Konstante, und wir bekommen eine spontane Magnetisierung von

$$M_0 = \exp\left\{-\frac{1}{4\kappa}\, G(0;0)\right\} \qquad d>2 \tag{4.79}$$

In 2 Dimensionen wäre das Fourier–Integral in $G(x-y;0)$ logarithmisch divergent bei $p=0$, deshalb erfordert $m\to 0$ mehr Sorgfalt:

$$\begin{aligned} G(0;m) &\simeq -\frac{1}{2\pi}\log m + 0.275795 && m\to 0 \\ \Rightarrow\quad M(h) &\sim \left(\frac{h}{\kappa}\right)^{1/(16\pi\kappa)} && h\to 0 \qquad d=2 \end{aligned} \tag{4.80}$$

Wie man sieht, lässt die Infrarot–Divergenz des masselosen Gitterpropagators in $d=2$ Dimensionen keine spontane Magnetisierung zu.
Und in einer Dimension:

$$\begin{aligned} G(0;m) &\simeq \frac{1}{2m} && m\to 0 \\ \Rightarrow\quad M(h) &\simeq \exp\left\{-\frac{1}{8}(\kappa h)^{-1/2}\right\} && 1\ll h\ll\kappa \qquad d=1 \end{aligned} \tag{4.81}$$

Diese Formel beschreibt aber **nicht** das Verhalten der Magnetisierung bei $h\to 0$, denn das System ist bei allen κ ungeordnet mit endlicher Korrelationslänge ξ, siehe Glg.(4.88) unten. Deshalb ist die Spinwellen–Näherung im Term $2h\sum_x \cos\varphi_x$ von (4.71) nur bei $h \gg 1$ gerechtfertigt. Für kleine h entwickelt man den Term direkt und bekommt (wegen der globalen Phaseninvarianz) ein lineares Verhalten:

$$\begin{aligned} M(h) &\simeq h \Big\langle \sum_y e^{i\varphi_x - i\varphi_y} \Big\rangle_{h=0} \\ &= h \sum_y \Gamma(x-y) \\ &= h\chi \\ &\simeq 8\kappa h \qquad h \to 0 \qquad d=1 \end{aligned} \tag{4.82}$$

Dabei wurde die Suszeptibilität für $h = 0$ aus Glg.(4.89) benutzt.

4.10.2 Korrelationsfunktion bei $h = 0$

$$\begin{aligned} \langle \Phi_x \Phi_y^* \rangle &= \langle e^{i(\varphi_x - \varphi_y)} \rangle = \langle e^{i\sum_z s_z \varphi_z} \rangle = \langle e^{i\, s\cdot\varphi} \rangle \\ \text{mit} \quad s_z &= \delta_{xz} - \delta_{yz} \\ \Rightarrow \quad \langle \Phi_x \Phi_y^* \rangle &= \exp\left\{ -\frac{1}{4\kappa}\, s \cdot (-\Delta)^{-1} s \right\} \\ &= \exp\left\{ -\frac{1}{2\kappa} \left[G(0;0) - G(x-y;0) \right] \right\} \end{aligned} \tag{4.83}$$

Nun ist

$$G(0;0) - G(x;0) = \int \frac{d^d p}{(2\pi)^d} \frac{1 - \cos p \cdot x}{\sum_\mu 2(1 - \cos p_\mu)} \tag{4.84}$$

tatsächlich in allen Dimensionen wohldefiniert, weil sich die Singularität bei $p = 0$ weghebt.
In $d > 2$ Dimensionen existieren beide Terme einzeln, $G(x;0)$ fällt mit wachsendem Abstand, und man muss die Korrelationsfunktion subtrahieren:

$$\begin{aligned} \langle \Phi_x \Phi_y^* \rangle &= \exp\left\{ -\frac{1}{2\kappa} G(0;0) \right\} \left[1 + \frac{1}{2\kappa} G(x-y;0) + \ldots \right] \\ &= M_0^2 \left[1 + \frac{1}{2\kappa} G(x-y;0) + \ldots \right] \\ \Rightarrow \quad \Gamma(x-y) &\simeq \frac{M_0^2}{2\kappa} G(x-y;0) \qquad |x-y| \to \infty \qquad d > 2 \end{aligned} \tag{4.85}$$

Hier sieht man den Goldstone–Mode!
In 2 Dimensionen gilt dagegen:

$$\begin{aligned} G(0;0) - G(x;0) &\simeq \frac{1}{2\pi} \log|x| + \text{const} \qquad |x| \to \infty \\ \Rightarrow \quad \Gamma(x-y) &\sim |x-y|^{-1/(4\pi\kappa)} \qquad |x-y| \to \infty \qquad d = 2 \end{aligned} \tag{4.86}$$

Und in einer Dimension:

$$
\begin{aligned}
G(0;0) - G(x;0) &= \frac{|x|}{2} \\
\Rightarrow \quad \Gamma(x-y) &= e^{-|x-y|/(4\kappa)} \qquad\qquad d = 1
\end{aligned}
\tag{4.87}
$$

Hier findet man also (für alle κ) eine ungeordnete Phase mit endlicher Korrelationslänge und Suszeptibilität. Für $\kappa \gg 1$ ist in Spinwellen–Näherung:

$$
\xi \simeq 4\kappa \tag{4.88}
$$

$$
\begin{aligned}
\chi &= \sum_x \Gamma(x) \;=\; 1 + 2\sum_{x\geq 1} e^{-x/\xi} \;=\; 1 + \frac{2e^{-1/\xi}}{1-e^{-1/\xi}} \\
&= \coth\frac{1}{2\xi} \\
&\simeq 8\kappa
\end{aligned}
\tag{4.89}
$$

4.10.3 Kosterlitz–Thouless–Phase

Sie tritt im 2–dimensionalen XY–Modell (und in der etwas allgemeineren komplexen ϕ^4–Version mit Potential V_λ) bei hinreichend großer Kopplung $\kappa \geq \kappa_c$ und Magnetfeld $h = 0$ auf und ist charakterisiert durch

1. $M = 0$ – keine langreichweitige Ordnung
2. $\xi = \infty$ – langreichweitige Korrelation
3. $\chi = \infty$ – divergente Fluktuationen der Magnetisierung

In der Spinwellennäherung findet man zu 1. aus Glg.(4.80) genauer:

$$
|M(h)| \sim |h|^{1/\delta} \tag{4.90}
$$

$$
\text{mit} \quad \delta = 16\pi\kappa \tag{4.91}
$$

und zu 2. liest man an Glg.(4.86) ein Potenzverhalten ab:

$$
\Gamma(x-y) \sim |x-y|^{-\eta} \tag{4.92}
$$

$$
\text{mit} \quad \eta = \frac{1}{4\pi\kappa} \tag{4.93}
$$

In $d = 2$ Dimensionen erwartet man eigentlich $\eta(\delta+1) = 4$, während die Spinwellennäherung $\eta\delta = 4$ liefert (gültig für $\kappa \to \infty$).
Die KT–Phase stellt eine *kritische Linie* $\kappa \geq \kappa_c$ dar, auf der die kritischen Exponenten variieren.

4.11 Phasenanalyse im endlichen System

In einer Monte–Carlo–Simulation hat man es immer mit einem endlichen System zu tun, z.B. mit einer periodischen Box der Größe $V = L^d$. Wie die Observablen auf die Systemgröße reagieren, ist Gegenstand der Theorie des *finite size scaling* (FSS). Wir wollen hier in einfacher Weise diskutieren, wie man mit Hilfe geeigneter Observablen, insbesondere ihres Verhaltens bei großem L, die Phase identifizieren kann.
Wegen der möglichen spontanen Symmetriebrechung sind interessante Phasenübergänge vor allem zu erwarten, wenn das Magnetfeld abgeschaltet ist. Nun wollen wir einerseits aufwendige Extrapolationen $h \to 0$ vermeiden und lieber direkt bei $h = 0$ simulieren. Dann sind wir aber andererseits auf phaseninvariante Observable angewiesen – im endlichen System würden sonst die Mittelwerte verschwinden. Das schließt aber eine direkte Bestimmung des Ordnungsparameters, d.h. der spontanen Magnetisierung aus. Wir halten trotzdem an der (konfigurationsweise definierten) Magnetisierung (4.24)

$$M[\Phi] \quad = \quad V^{-1} \sum_x \Phi_x$$

fest, gründen unsere Analyse aber auf die Mittelwerte gewisser Momente des Betrags $|M[\Phi]|$.

4.11.1 $\langle |M|^2 \rangle$

Um den Zusammenhang zu Korrelationsfunktion und Suszeptibilität herzustellen, nutzen wir die Translationsinvarianz aus und schreiben

$$\begin{aligned} \langle |M|^2 \rangle &= V^{-2} \sum_{xy} \langle \Phi_x \Phi_y^* \rangle \\ &= V^{-1} \sum_x \langle \Phi_x \Phi_0^* \rangle \end{aligned} \tag{4.94}$$

In einer **ungeordneten** (paramagnetischen) **Phase** mit kurzreichweitigen (exponentiell abfallenden) Korrelationen führt die Summe über die die Korrelationsfunktion auf die Suszeptibilität, d.h. der Mittelwert verschwindet wie

$$\langle |M|^2 \rangle \quad \simeq \quad \chi L^{-d} \qquad L \to \infty \tag{4.95}$$

In einer **KT–Phase** zeigt die Spinwellen–Näherung, dass

$$\begin{aligned} \langle \Phi_x \Phi_y^* \rangle &\equiv \Gamma(x-y) \\ &\approx \exp\{-2\pi\eta\,[G(0;0) - G(x-y;0)]\} \\ &\sim |x-y|^{-\eta} \qquad\qquad |x-y| \to \infty \\ \text{mit} \quad \eta &= \frac{1}{4\pi\kappa} \end{aligned} \tag{4.96}$$

Diese Korrelationsfunktion fällt so langsam ab, dass die Summe in (4.94) im unendlichen Volumen divergieren würde. Es ist plausibel (und lässt sich numerisch oder durch FSS belegen), dass

$$\sum_x \Gamma(x) \quad \sim \quad L^{2-\eta}$$

In einer **Goldstone–Phase** schließlich wird $\Gamma(x)$ (hier unsubtrahiert, weil im endlichen Volumen genommen) bei großem Abstand auf das (invariante!) Quadrat des Ordnungsparameters $|M_0|^2$ abfallen.
Zusammengefasst:

$$\langle |M|^2 \rangle \quad \simeq \quad \begin{cases} \chi L^{-d} & \text{ungeordnet} \\ \text{const}\, L^{-\eta} & \text{K.T.} \\ |M_0|^2 & \text{Goldstone} \end{cases} \tag{4.97}$$

4.11.2 Binder–Parameter

Hier kommt zusätzlich das vierte Moment von $|M[\Phi]|$ ins Spiel, ausgeschrieben:

$$\langle |M|^4 \rangle \quad = \quad V^{-4} \sum_{xyzu} \langle \Phi_x \Phi_y^* \Phi_z \Phi_u^* \rangle \tag{4.98}$$

In einer **ungeordneten Phase** zerlegt man den Mittelwert von Φ^4 nach Korrelationen:

$$\begin{aligned} \langle \Phi_x \Phi_y^* \Phi_z \Phi_u^* \rangle \quad &= \quad \langle \Phi_x \Phi_y^* \rangle \langle \Phi_z \Phi_u^* \rangle \\ &+ \quad \langle \Phi_x \Phi_u^* \rangle \langle \Phi_z \Phi_y^* \rangle \\ &+ \quad \langle \Phi_x \Phi_y^* \Phi_z \Phi_u^* \rangle_c \end{aligned}$$

Die Summation der Viererkorrelation definiert eine Kopplungskonstante g_4:

$$\sum_{xyzu} \langle \Phi_x \Phi_y^* \Phi_z \Phi_u^* \rangle_c \quad \equiv \quad -V g_4 \chi^2$$

während z.B.

$$\begin{aligned} \sum_{xy} \langle \Phi_x \Phi_y^* \rangle \quad &= \quad V\chi \\ \Rightarrow \quad \langle |M|^4 \rangle \quad &\simeq \quad 2V^{-2}\chi^2 - V^{-3} g_4 \chi^2 \end{aligned}$$

In der **KT–Phase** hilft wieder die Spinwellen–Näherung weiter: der Erwartungswert in (4.98) lässt sich durch die Korrelationsfunktionen (4.96) ausdrücken:

$$\text{mit} \quad s_w \quad = \quad \delta_{wx} - \delta_{wy} + \delta_{wz} - \delta_{wu}$$

$$
\begin{aligned}
\Rightarrow \quad \langle \Phi_x \Phi_y^* \Phi_z \Phi_u^* \rangle &= \langle e^{i \sum_w s_w \varphi_w} \rangle \\
&= \langle e^{is \cdot \varphi} \rangle \\
&\approx \exp\{-\frac{1}{4\kappa} s \cdot Gs\} \\
&= \exp\Big\{ -\frac{1}{4\kappa}[4G(0) - 2G(x-y) + 2G(x-z) \\
&\quad -2G(x-u) - 2G(y-z) + 2G(y-u) - 2G(z-u)]\Big\} \\
&= \frac{\Gamma(x-y)\Gamma(x-u)\Gamma(y-z)\Gamma(z-u)}{\Gamma(x-z)\Gamma(y-u)} \\
\Rightarrow \quad \langle |M|^4 \rangle &= V^{-3} \sum_{xyz} \frac{\Gamma(x-y)\Gamma(x)\Gamma(y-z)\Gamma(z)}{\Gamma(x-z)\Gamma(y)} \qquad (4.99)
\end{aligned}
$$

Was wird daraus bei $L \to \infty$? Da die $\Gamma(x-y)$ nur langsam mit dem Abstand abfallen, kann man sie versuchsweise unter der Summe durch ihren Mittelwert

$$
\begin{aligned}
\overline{\Gamma} &\equiv V^{-1} \sum_x \Gamma(x) \\
&= \langle |M|^2 \rangle
\end{aligned}
$$

ersetzen und bekommt

$$
\langle |M|^4 \rangle \stackrel{?}{\approx} \overline{\Gamma}^2 = \langle |M|^2 \rangle^2 \qquad (4.100)
$$

Dieses sehr grobe Argument wird im wesentlichen bestätigt durch numerische Auswertung von (4.99) (oder auch durch FSS–Argumente), man findet

$$
\langle |M|^4 \rangle \simeq 1.02 \langle |M|^2 \rangle^2 \qquad (4.101)
$$

In einer **Goldstone–Phase** schließlich erwartet man

$$
\langle |M|^4 \rangle \simeq |M_0|^4 \qquad (4.102)
$$

Der Binder–Parameter zeigt also in den verschiedenden Phasen folgendes Verhalten bei $L \to \infty$:

$$
\begin{aligned}
U_4 &\equiv 2 - \frac{\langle |M|^4 \rangle}{\langle |M|^2 \rangle^2} \\
&\simeq \begin{cases} g_4 L^{-d} & \text{ungeordnet} \\ 0.98 & \text{K.T.} \\ 1 & \text{Goldstone} \end{cases} \qquad (4.103)
\end{aligned}
$$

Aus der Sicht des Binder–Parameters könnte man die K.T.–Phase für nahezu geordnet halten, während sie in $\langle |M|^2 \rangle$ eher ungeordnet wirkt, wenn auch mit divergierender Suszeptibilität.