

Skriptum
Elektronischen Datenverarbeitung II
Teil IIb: Monte Carlo Simulation

K. Held

Fakultät für Physik

Technische Universität Wien

18. Mai 2012

Inhaltsverzeichnis

1	Monte-Carlo-Simulationen	5
1.1	Motivation: Ising-Modell	5
1.2	Wiederholung: Statistische Physik	7
1.3	Monte-Carlo-Integration	10
1.4	Physik des Ising-Modells	15
1.5	Monte-Carlo-Simulation des Ising-Modells	18
1.6	„Finite-size scaling“	22
1.6.1	Renormierungsgruppe, Skaleninvarianz und Universalität	23
1.6.2	Anwendung der Skalierung für das „finite-size scaling“	26

Kapitel 1

Monte-Carlo-Simulationen

Ein aus der Statistischen Physik motiviertes Verfahren zur Berechnung von Integralen mit Hilfe von Zufallszahlen ist die Monte-Carlo-Methode. Dieses Verfahren ist äußerst allgemein und erlaubt es – zumindest im Prinzip – jedes Problem der Statistischen Physik zu lösen (zu simulieren). In der Physik werden heutzutage mit Hilfe von Monte-Carlo-Simulationen beispielsweise Teilchenströme am CERN simuliert oder korrelierte (wechselwirkende) Elektronen in Festkörpern. Monte-Carlo-Simulationen werden aber nicht nur in der Physik sondern in vielen Bereichen von den Ingenieur-Wissenschaften über die medizinische Bildverarbeitung bis hin zu den Sozialwissenschaften angewandt.

In Abschnitt 1.1 wird als Motivation zunächst das Ising-Modell, das wir später simulieren wollen, vorgestellt. Abschnitt 1.2 rekapituliert einige grundlegende Beziehungen der Statistischen Physik. In Abschnitt 1.3 wird die Monte-Carlo-Methode zunächst als allgemeine Methode zur Integration hoch-dimensionaler Integrale eingeführt. Im Abschnitt 1.4 wird die Physik des Ising-Modell besprochen und in Abschnitt 1.5 dessen Monte-Carlo-Simulation vorgestellt. Wie man aus den Monte-Carlo-Ergebnissen mit Hilfe von Beziehungen aus der Renormierungsgruppentheorie die kritische Temperatur und die kritischen Exponenten genau bestimmt, wird in Abschnitt 1.6 besprochen. Weiterführende Literatur zu diesem Kapitel:

- Werner Krauth, *Statistical Mechanics: Algorithms and Computations*, Oxford University Press, Oxford (2006), ISBN-0-19-851536-7.
- Kurt Binder, *Monte Carlo methods in statistical physics*, Springer, Berlin (1979), ISBN 3-540-09018-5.

Die Bilder dieses Kapitels und viele Anregungen wurden dankenswerterweise von Dr. Nils Blümer zur Verfügung gestellt.

1.1 Motivation: Ising-Modell

Das *Ising-Modell* ist ein einfaches Modell wechselwirkender Spins für den Ferromagnetismus, das *Ernst Ising* in seiner Dissertation 1924 [1] bei *Wilhelm Lenz* (auch bekannt

vom Runge-Lenz-Vektor) erstmals studierte. Interessanterweise wurde das Modell von Ising und Lenz zunächst verworfen, da sie das eindimensionale Modell untersuchten und bei Temperaturen $T > 0$ keinen Ferromagnetismus fanden. Ising wurde später Lehrer und emigrierte wegen seiner jüdischen Wurzeln via Luxemburg in die USA. Lars Onsager löste 1944 das zweidimensionale Ising-Modell [2], das Ferromagnetismus zeigt. Das Ising-Modell wurde daraufhin berühmt und *Ernst Ising* Professor an der Bradley University, Peoria, Illinois, wo er aber keine weiteren wissenschaftlichen Arbeiten publizierte.

Das *Ising-Modell* für (klassische) Spins $\sigma_i \in \{+1, -1\} = \{\uparrow, \downarrow\}$ auf N Gitterplätzen i, j im magnetischen Feld B lautet:

$$\mathcal{H} = -J \sum_{\langle ij \rangle} \sigma_i \sigma_j - \mu_B B \sum_i \sigma_i. \quad (1.1)$$

Hierbei bezeichnet $\langle ij \rangle$ die Summation über alle Gitterplätze i und deren jeweiligen Nachbarn j . Die (quantenmechanische) Verallgemeinerung ist das Heisenberg-Modell

$$\mathcal{H} = -J \sum_{\langle ij \rangle} \vec{S}_i \vec{S}_j - \mu_B B \sum_i \vec{S}_i^z, \quad (1.2)$$

das auch Terme $S_i^x S_j^x$ bzw. mit Spin-Leiteroperatoren $S_i^+ S_j^-$ enthält.

Die Kopplung der Spins ist für $J > 0$ ($J < 0$) ferromagnetisch (antiferromagnetisch) und beschreibt für $J = 0$ den trivialen Fall einzelner nicht-gekoppelter Spins. Die Eigenschaften hängen, wie wir später sehen werden, stark vom zugrundeliegenden Gitter (und insbesondere von dessen Dimensionalität) ab. Die Kopplungskonstante J kann beispielsweise mit Hilfe der Dichtefunktionaltheorie (DFT) abgeschätzt werden: als Differenz der Grundzustandsenergie einer ferromagnetischen und antiferromagnetischen Lösung. Das Heisenberg- bzw. Ising-Modell hat die gleiche Energiedifferenz (Erwartungswert) zwischen vollständig polarisiertem ferromagnetischen Grundzustand und antiferromagnetisch-alternierenden Spins (Néel-Zustand). Sowohl das Ising- als auch das Heisenberg-Modell nehmen aber an, dass die Elektronen im Festkörper als Spins an den Gitterplätzen lokalisiert sind. Diese Annahme ist für einige Isolatoren geeignet, aber sicherlich nicht für Metalle, da dort die delokalisierten Leitungselektronen maßgebend sind. In diesem Sinne ist es ein einfaches Modell für den Magnetismus.

Zwecks einer genaueren Beschreibung können Ising-(und Heisenberg-)Modell auch auf beliebige Wechselwirkungen zwischen den Spins verallgemeinert werden:

$$\mathcal{H} = -\frac{1}{2} \sum_{i,j=1}^N J_{ij} \sigma_i \sigma_j - \mu_B B \sum_{i=1}^N \sigma_i. \quad (1.3)$$

Beachte: Die Symmetrie des Heisenberg-Modells ist $SU(2)$, während das Ising-Modell eine sogenannte Z_2 -Symmetrie (up/down) hat. Die Spins des Ising-Modells können als klassische Zahlen (+1/-1 für Spin up/down) behandelt werden, und der Hamilton-Operator ist in dieser Basis direkt diagonal. D.h. wie bei einem Modell der klassischen

statistischen Mechanik ist die Energie einfach eine Funktion der Spinkonfiguration, ein quantenmechanischer Operator wird nicht wirklich benötigt. Es gibt keine für ein quantenmechanisches Problem typische Dynamik in der Zeit mit einer Änderung der Wellenfunktion. Statt Spins kann man sich auch vorstellen (und dies ist tatsächlich auch eine Anwendung), dass das Ising-Modell zwei Sorten Atome A und B (up und down) beschreibt, die an Gitterplätzen fixiert sind. Das “Magnetfeld” B beschreibt dann die energetisch unterschiedliche Bevorzugung (chemisches Potential) der beiden Atomspezies und die Kopplungskonstante $J > 0$ ($J < 0$) die energetische Bevorzugung (Benachteiligung) einer Clusterbildung. Aus diesen Gründen bezeichnet man das Ising-Modell auch manchmal als Modell *klassischer* Spins, obwohl das Konzept eines Spins natürlich quantenmechanisch ist.

1.2 Wiederholung: Statistische Physik

In diesem Abschnitt stellen wir einige grundlegende Beziehungen der Statistischen Physik als Wiederholung kurz zusammen. Die quantenmechanische *Zustandssumme* lässt sich berechnen als Spur

$$Z = \text{Tr}\{e^{-\beta\mathcal{H}}\} \quad (1.4)$$

mit inverser Temperatur $\beta = \frac{1}{k_B T}$ und Hamilton-Operator \mathcal{H} . Ähnlich ergibt sich für physikalischen Observablen \mathcal{O} in der Quantenmechanik:

$$\langle \mathcal{O} \rangle = \frac{1}{Z} \text{Tr}\{\mathcal{O}e^{-\beta\mathcal{H}}\}. \quad (1.5)$$

In der klassischen Mechanik haben wir einen ähnlichen Ausdruck als Integration über den Phasenraum mit orts- und impulsabhängiger Energie $E(x_1, p_1 \dots x_N, p_N)$:

$$Z = \frac{1}{N!h^{3N}} \int d^3x_1 \int d^3p_1 \dots \int d^3x_N \int d^3p_N e^{-\beta E(x_1, p_1 \dots x_N, p_N)}, \quad (1.6)$$

wobei N die Anzahl der Teilchen und h die Plancksche Konstante ist. Entsprechend gilt für die physikalische Observablen

$$\langle \mathcal{O} \rangle = \frac{1}{Z} \frac{1}{N!h^{3N}} \int d^3x_1 \int d^3p_1 \dots \int d^3x_N \int d^3p_N \mathcal{O}(x_1, p_1 \dots x_N, p_N) e^{-\beta E(x_1, p_1 \dots x_N, p_N)}. \quad (1.7)$$

Hierbei lässt sich der Faktor h^{3N} als Phasenvolumen quantenmechanischer Teilchen, die hier klassisch behandelt werden, deuten. Der Faktor $1/N!$ berücksichtigt die quantenmechanische Ununterscheidbarkeit der Teilchen.

Analog können wir die Zustandssumme des im letzten Abschnitt eingeführten Ising-Modells für N Spins angeben:

$$Z = \sum_{\sigma_1=\pm 1} \dots \sum_{\sigma_N=\pm 1} e^{-\beta \mathcal{H}_{\text{ising}}(\sigma_1 \dots \sigma_N)}. \quad (1.8)$$

Hierbei ist der Hamilton-Operator bzw. die Hamilton-Funktion, die für vorgegebene Spin-Konfiguration $\{\sigma_i\}$ die Energie angibt

$$\mathcal{H}_{\text{Ising}} = -J \sum_{\langle ij \rangle} \sigma_i \sigma_j - \mu_B B \sum_i \sigma_i \quad (1.9)$$

Observablen O des Ising-Modells lassen sich demnach wie folgt berechnen:

$$\langle O \rangle = \frac{1}{Z} \sum_{\sigma_1=\pm 1} \cdots \sum_{\sigma_N=\pm 1} O(\sigma_1 \cdots \sigma_N) e^{-\beta \mathcal{H}_{\text{Ising}}(\sigma_1 \cdots \sigma_N)}.$$

Ein (naheliegendes) Beispiel einer Observablen ist z.B. die Magnetisierung $O(\sigma_1 \cdots \sigma_N) = \mu_B \sum_{i=1}^N \sigma_i$.

Aus der Zustandssumme lassen sich durch entsprechende Ableitungen alle thermodynamischen Größen berechnen z.B. die freie Energie

$$F = -k_B T \ln Z ; \quad (1.10)$$

die Innere Energie

$$\begin{aligned} E = \langle \mathcal{H} \rangle &= \frac{\sum_x E(x) e^{-\beta E(x)}}{\sum_x e^{-\beta E(x)}} = \frac{-\frac{\partial Z}{\partial \beta}}{Z} \\ &= -\frac{\partial(\ln Z)}{\partial \beta} = \frac{\partial(\beta F)}{\partial \beta} = F + \beta \frac{\partial F}{\partial \beta} \\ &= F - T \frac{\partial F}{\partial T} = F + TS , \end{aligned} \quad (1.11)$$

wobei x die Quantenmechanischen Eigenfunktionen bzw. die klassischen Orts- und Impulskoordinaten bezeichnet, und S die Entropie

$$S = -\frac{\partial F}{\partial T} ; \quad (1.12)$$

die spezifische Wärme

$$C = \frac{\partial E}{\partial T} = \frac{\partial E}{\partial \beta} \frac{\partial \beta}{\partial T} = \frac{\langle \mathcal{H}^2 \rangle - \langle \mathcal{H} \rangle^2}{(k_B T)^2} ; \quad (1.13)$$

die Magnetisierung (hier für das Ising-Modell):

$$M = \mu_B \langle \sum_i \sigma_i \rangle = \frac{1}{\beta} \frac{\partial(\ln Z)}{\partial B} ; \quad m = \frac{M}{N \mu_B}. \quad (1.14)$$

Phasenübergänge

Ein anderes wichtiges Konzept der statistischen Physik ist das der Phasenübergänge. Diese machen sich als Singularitäten in thermodynamischen Größen bemerkbar.

Klassifikation nach Ehrenfest

1. *Ordnung*: 1. Ableitung von F nicht kontinuierlich
2. *Ordnung*: 1. Ableitung von F kontinuierlich;
 2. Ableitung nicht kontinuierlich (möglicherweise divergent)

Observablen wie z.B. die Magnetisierung sind bei Phasenübergängen 1. Ordnung kontinuierlich, nicht jedoch bei Phasenübergängen 2. Ordnung. Nach Ehrenfest spricht man bei Divergenzen in höheren (z.B. in der N ten) Ableitungen von F auch von einem entsprechenden Phasenübergang N ter Ordnung. In einer moderneren Beschreibung unterscheidet man jedoch nur noch diskontinuierliche (1. Ordnung) und kontinuierliche (2. Ordnung bzw. höherer Ordnung).

Beachte: Für ein endliches System gibt es keine Phasenübergänge. Beispielsweise haben wir für ein Ising-Modell mit endlich vielen Gitterplätzen N die Zustandssumme

$$Z = \sum_{\sigma_1=\pm 1} \cdots \sum_{\sigma_N=\pm 1} e^{-\beta \mathcal{H}_{\text{ising}}(\sigma_1 \cdots \sigma_N)}. \quad (1.15)$$

Dies ist eine (endliche) Summe von N Exponentialfunktionen und daher eine analytische (∞ -oft ableitbare) Funktion. Daher ist die Analyse von Phasenübergängen mit numerischen Methoden für endliche Systeme besonders schwierig. Sprich, ein *finite size scaling* d.h. die (numerische) Untersuchung des Grenzwerts $N \rightarrow \infty$ ist essentiell und muss sorgfältig durchgeführt werden.

In der Nähe von Phasenübergängen folgen physikalische Observable universellen Gesetzmäßigkeiten die durch kritische Exponenten charakterisiert werden:

$$\left. \begin{array}{ll} \text{Magnetisierung} & m = m_0 \epsilon^\beta \\ \text{Suszeptibilität} & \chi = \chi_0 \epsilon^{-\gamma} \\ \text{Spezifische Wärme} & C = C_0 \epsilon^{-\alpha} \\ \text{Korrelationslänge} & \xi = \xi_0 \epsilon^{-\nu} \\ \text{Magnetisierung bei } T_c & m \propto B^{\frac{1}{\delta}} \end{array} \right\} \epsilon = \left| 1 - \frac{T}{T_c} \right| \quad (1.16)$$

Universalität bedeutet dabei, dass die Exponenten nicht vom zugrundeliegenden Modell abhängen sondern nur von der Dimension und von der Symmetrie des Ordnungsparameters.¹ Das bedeutet z.B. dass die kritischen Exponenten (nicht aber die kritische Temperatur) des Ising-Modells auf dem zweidimensionalen Quadrat- und Dreiecks-Gitter gleich sind, aber unterschiedlich von denen eines dreidimensionalen kubischen Gitters. Außerdem haben Ising- und Heisenberg-Modell eine unterschiedliche Symmetrie für den (magnetischen) Ordnungsparameter, Z_2 vs. $SU(2)$, und damit unterschiedliche kritische Exponenten.

¹Der Ordnungsparameter ist die charakteristische physikalische Größe für den Phasenübergang, die vor dem Übergang Null ist und danach sprunghaft (1. Ordnung) oder mit kritischen Exponenten stark ansteigt (2. Ordnung). Für den ferromagnetischen Phasenübergang ist dies beispielsweise die Magnetisierung.

1.3 Monte-Carlo-Integration

Wir wollen uns nun dem Monte-Carlo-Verfahren als allgemeinem Verfahren zur Lösung von Integralen (oder Summen) zuwenden. Solche Integrale oder Summen treten beispielsweise – aber natürlich nicht nur – in der Statistischen Physik auf (s. letzter Abschnitt). Das generische Problem ist dabei das Integral I einer Funktion $f(\vec{x})$ über das d dimensionale Volumen V :

$$I = \int_V d^d x f(\vec{x}); \quad V \subset \mathbb{R}^d. \quad (1.17)$$

Deterministische Verfahren

Die bislang in der Vorlesung behandelten Verfahren sind deterministisch, d.h. verwenden ein fixes Raster an Stützstellen $\vec{x}_{\vec{n}}$ z.B. bei den Newton-Cotes-Regeln ein homogenes (und isotropes) Gitter mit Abstand h (hier für d Dimensionen):

$$\vec{x}_{\vec{n}} = h\vec{n} \quad (\vec{n} \in \mathbb{Z}^d) \quad (1.18)$$

Das Integral läßt sich durch eine diskrete Summe approximieren (numerische Integration):

$$I \approx h^d \sum_{\substack{\vec{n} \\ \vec{x}_{\vec{n}} \in V}} f(\vec{x}_{\vec{n}}) \quad (1.19)$$

Für hochdimensionale Integrale, wie sie in der statistischen Physik auftauchen, ist die Anwendung dieser deterministischen Verfahren aber problematisch. Der Fehler ΔI ist je nach Grad der Newton-Cotes-Regel proportional zu h^s (z.B. h^2 bei der Trapez-Regel). Der Aufwand t , der zur Berechnung des Integrals notwendig ist, d.h. die Anzahl der benötigten Rechenoperationen bzw. die Rechenzeit skaliert andererseits proportional zur Anzahl der berechneten Funktionswerte $f(\vec{x})$ bzw. proportional zur Anzahl der Stützstellen. Für ein d -dimensionales Volumen ergibt sich :

$$t \approx \frac{V}{h^d} \propto h^{-d} \quad (1.20)$$

Dies kann man umrechnen in den Fehler, den man nach der Rechenzeit t erhält:

$$\Delta I \propto h^s \propto t^{-\frac{s}{d}} \quad (1.21)$$

Für große Dimensionen d bedeutet dies, dass der Fehler extrem langsam abnimmt und daher extrem lange Rechenzeiten benötigt werden. Betrachten wir beispielsweise die Trapez-Regel mit $s = 2$ und $d = 200$, so muss man, um den Fehler zu halbieren die Rechenzeit um den Faktor

$$2^{d/s} = 2^{100} \approx 10^{30} \quad (1.22)$$

erhöhen. D.h. in der Praxis lassen sich keine hochdimensionalen Integrale berechnen. Solche hochdimensionalen Integrale tauchen in der statistischen Physik jedoch typischerweise auf. Wollen wir beispielsweise die Zustandssumme (1.6) für 33 Teilchen berechnen, so erfordern die (pro Teilchen) drei Impuls- und Orts-Koordinaten also ein $d = 33 \times 6 = 198$ dimensionales Integral.

Alternative: *Stochastische Verfahren*

(i) **Monte-Carlo-Integration (MC) ohne Gewichtung (simple Monte Carlo)**
Alternativ können wir das Integral einfach dadurch berechnen, indem wir die Funktion an N zufälligen Punkten berechnen und aufaddieren:

$$I_N = V \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N f(\vec{x}_i). \quad (1.23)$$

Hierbei sollen alle Punkte \vec{x} zunächst die gleiche Wahrscheinlichkeit

$$p(\vec{x}) = \frac{1}{V} \quad (1.24)$$

haben und zufällig gewählt werden. Auf dem Computer müssen wir hierzu einen Zufallszahlen-Generatoren benutzen, um die Konfigurationen \vec{x}_i auszuwürfeln.

Der Zentrale Grenzwertsatz besagt nun, dass

$$I_N \xrightarrow{N \rightarrow \infty} I \quad (1.25)$$

wobei der Fehler durch die Standardabweichung σ_f der Funktion f im Volumen V gegeben ist:

$$\Delta I_N = \frac{\sigma_f}{\sqrt{N}} \xrightarrow{N \rightarrow \infty} 0. \quad (1.26)$$

Übersetzen wir dies in die Rechenzeitabhängigkeit des Fehlers, so ergibt sich:

$$\Delta I_N \sim t^{-\frac{1}{2}}. \quad (1.27)$$

D.h. ab $d \geq 5$ konvergiert die Monte-Carlo-Integration schneller als die Trapez-Regel mit $\Delta I_W \propto t^{-5/2}$. Nehmen wir wiederum das 200-dimensionale Integral als Beispiel, so ergibt sich, dass man den Fehler halbieren kann bei einer lediglich 4-fach längeren Rechenzeit (statt einer 10^{30} -fach längeren Rechenzeit der Trapez-Regel).

Ein einfaches – wenn auch lediglich zweidimensionales – Beispiel ist die Berechnung der Zahl π :

$$\pi/4 = I = \int_0^1 dx \int_0^1 dy \theta(1 - x^2 - y^2) \quad (1.28)$$

Dieses Integral kann man einfach am Strand mit Hilfe der Monte-Carlo-Integration gemäß Glg. (1.23) berechnen: Man markiert einen Viertelkreis in einem Rechteck, wirft Steinchen ins Rechteck und zählt den Anteil der Steinchen, die im Viertelkreis landen (d.h. θ -Funktion $\theta(1 - x^2 - y^2) = 1$); s. Abbildung 1.1.

(ii) Monte Carlo mit Gewichtung („importance sampling“)

Problem: Oft ist die Standardabweichung σ_f groß. Insbesondere bei Anwendungen aus der Statistischen Physik mit einem exponentiellen Boltzmann-Faktor $\exp\{-\beta E(x)\}/Z$ variiert die zu integrierende Funktion $f(x) = \mathcal{O}(x) \exp\{-\beta E(x)\}/Z$ typischerweise um mehrere Größenordnungen.

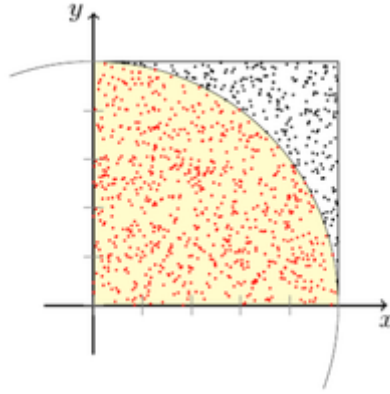


Abbildung 1.1: Berechnung von π am Strand — eine beliebte Urlaubsbeschäftigung.

Idee: Um dieses Problem zu beseitigen, konzentriert man die erzeugten \vec{x}_i auf die Regionen, in denen f besonders gross ist. Diese Regionen müssen besonders genau erfasst werden, da sie für das Integral besonders wichtig sind („importance sampling“). In Regionen mit sehr kleinem f braucht man dagegen pro Volumen weniger Punkte \vec{x}_i .

Mathematisch separiert man $f(\vec{x}) = p(\vec{x}) o(\vec{x})$ in zwei Anteile: eine Wahrscheinlichkeitsverteilung $p(\vec{x}) > 0$ mit $\int_V d^d x p(\vec{x}) = 1$ und eine Observable $o(\vec{x})$:

$$I = \int_V d^d x f(\vec{x}) = \int_V d^d x p(\vec{x}) o(\vec{x}) \quad (1.29)$$

$$\approx \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N o(\vec{x}_i); \quad \vec{x}_i \text{ Zufallskonfigurationen nach } p(\vec{x}) \quad (1.30)$$

Die Punkte \vec{x}_i werden jetzt gemäß der Wahrscheinlichkeitsverteilung $p(\vec{x})$ generiert. Typisches Beispiel einer Wahrscheinlichkeitsverteilung ist natürlich der Boltzmann-Faktor $\exp\{-\beta E(x)\}/Z$, aber man kann auch andere Funktionen wählen z.B. die violette P_{imp} Kurve in der Abbildung 1.2 zur Veranschaulichung des „importance sampling“.

Der Vorteil ist, dass sich der Fehler jetzt aus der Standardabweichung der Observablen $o(\vec{x})$ ergibt, die um Größenordnungen kleiner sein kann als die Standardabweichung von f

$$\Delta I_N = \frac{\sigma_o}{\sqrt{N}}; \quad \text{mit } \sigma_o \ll \sigma_f (!) \text{ für eine geschickte Wahl von } o(\vec{x}), p(\vec{x}) \quad (1.31)$$

(iii) Markov-Kette, Metropolis-Algorithmus

Es verbleibt das **Problem**, zufällige Konfigurationen (Punkte) \vec{x}_i gemäß einer vorgegebenen Wahrscheinlichkeitsverteilung $p(\vec{x})$ zu generieren. Man kann beispielsweise eine sogenannte Markov-Kette an Punkten x_1, x_2, \dots, x_n generieren (hier und im Folgenden werden wir übersichtshalber die Vektor-Pfeile unterdrücken).

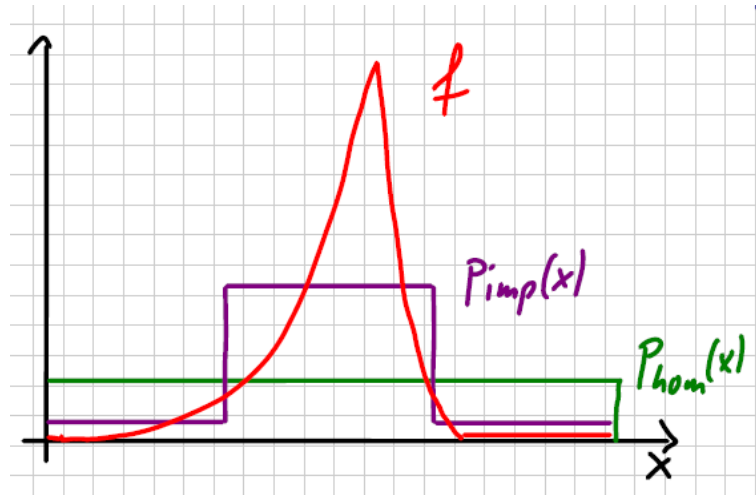


Abbildung 1.2: Statt wie beim einfachen Monte-Carlo die Punkte zur Berechnung des Integrals homogen im gesamten Volumen (P_{hom}) auszuwürfeln ist es effektiver, häufiger Punkte in Bereichen mit großem (wichtigem) Funktionswert f zu berechnen („importance sampling“) beispielsweise mit dem P_{imp} der Skizze.

Definition Markov-Kette: Jede Konfiguration x_n hängt nur vom Vorgänger in der Kette x_{n-1} ab; d.h. es ist kein Gedächtnis älterer Konfigurationen vorhanden.

Bezeichnen wir mit $W(x'|x)$ die Wahrscheinlichkeit $x_n = x'$ als n tes Element der Kette zu erhalten, falls der Vorgänger $x_{n-1} = x$ war. Dann gilt die folgende Master-Gleichung für die Wahrscheinlichkeitsverteilung $p_n(x)$ der Konfigurationen in Schritt n , wenn im Vorgänger-Schritt $n - 1$ die Verteilung $p_{n-1}(x)$ vorlag:

$$p_n(x) = p_{n-1}(x) + \sum_{x'} W(x|x') p_{n-1}(x') - \sum_{x'} W(x'|x) p_{n-1}(x). \quad (1.32)$$

Eine hinreichendes (aber nicht notwendiges) Kriterium für die Stationarität von $p_n(x)$ (d.h. einer sich mit $n \rightarrow n + 1$ nicht mehr ändernden Wahrscheinlichkeitsverteilung $p_n(x) \rightarrow p_{\text{eq}}(x)$) ist die „detailed balance“ (detailliertes Gleichgewicht):

$$W(x|x') p_{\text{eq}}(x') = W(x'|x) p_{\text{eq}}(x) \quad \forall x, x'. \quad (1.33)$$

In diesem Fall heben sich die beiden Integrale/Summen in Glg. (1.32) für jedes x' einzeln auf. Notwendig wäre aber nur, dass sich die Summen/integral über x' für jedes x der linken Seite aufheben.

Markov-Ketten Monte-Carlo Algorithmus

Wir konstruieren eine Markov-Kette d.h. entsprechende Übergangswahrscheinlichkeiten $W(x'|x)$ mit (i) stationärem $p(x)$ (aufgrund der „**detailed balance**“) und (ii) **Ergodizität** (d.h. alle Konfigurationen können von jedem Startpunkt durch eine end-

liche Anzahl Übergänge erreicht werden). In diesem Fall folgen die erzeugten Konfigurationen x_n (für n groß genug) der stationären (Gleichgewichts-) Wahrscheinlichkeitsverteilung $p_{eq}(x)$ aus Glg. (1.33).

Hierbei muss n groß genug sein, denn p_n muss erst gegen p_{eq} konvergieren. Die ersten Konfigurationen hängen noch stark von der anfangs gewählten Wahrscheinlichkeitsverteilung p_1 ab, die oftmals eine δ -Funktion ist. Sprich, wir geben ein ganz bestimmtes x_1 fix vor.

Der *Metropolis-Algorithmus*

$$W(x'|x) = \min\{1, r\}; \text{ mit } r = \frac{p_{eq}(x')}{p_{eq}(x)} \quad (1.34)$$

ist eine mögliche Wahl für $W(x'|x)$ um die „detailed balance“ zu erfüllen. Das Metropolis-Verfahren hat die größt-möglichen Übergangsraten $W(x'|x)$. Eine alternative ist das „heat bath“ (*Wärme-Bad-Verfahren*) mit

$$W(x'|x) = r/(1+r); \text{ mit } r = \frac{p_{eq}(x')}{p_{eq}(x)}. \quad (1.35)$$

In der Statistischen Physik nimmt man typischerweise das Boltzmann-Gewicht $p_{eq}(x) = e^{-\beta E(x)}/Z$. Da nur Quotienten $\frac{p_{eq}(x')}{p_{eq}(x)}$ eingehen, hebt sich die Zustandssumme Z auf, muss also nicht explizit berechnet werden.

Wir wollen jetzt den Algorithmus für die Monte-Carlo-Integration mit „importance sampling“ kurz vorstellen:

Algorithmus:

0. Initialisiere (wähle) Konfiguration x
1. Wähle neue Konfiguration x'
2. Berechne Energiedifferenz $\Delta E = E(x') - E(x)$ und $r = e^{-\beta \Delta E}$
3. Erzeuge Zufallszahl $\text{rand} \in [0, 1)$
4. Wenn $\text{rand} \leq \min(1, r)$ akzeptiere neue Konfiguration $x = x'$, sonst lasse x unverändert.
5. Nach einigen „runs“ (Durchläufen)², berechne Observablen
6. Solange noch nicht genug „runs“ gehe zu Schritt 1.)

²Wie oben erwähnt hängen die ersten Konfigurationen von der Wahl der Ausgangs-Konfiguration in Schritt 0.) ab ($p_n = p_{eq}$ erst nach einigen Schritten n). Typischerweise werden die ersten 1%-10% „runs“ deshalb verworfen. Man spricht von „warm-up runs“ im Unterschied zu den späteren Mess „runs“ für die Messung der Observablen mit Konfigurationen gemäß $p_{eq}(x)$.

Bemerkungen:

- (i) Im kontinuierlichem Fall (z.B. klassische Statistische Physik) ist eine mögliche Wahl für die neue Konfiguration $x' = x + (\text{rand}' - 0.5) \times \text{stepsize}$ (in d Dimensionen: ähnliche Zufalländerung in allen d Richtungen).
- (ii) Zustandssumme Z und freie Energie lassen sich auf diese Weise nicht messen.

1.4 Physik des Ising-Modells

„Mean-field“ Lösung

Bei der „mean-field“ (MF) oder auf Deutsch Molekularfeld-Approximation werden Korrelationen zwischen den Gitterplätzen vernachlässigt. D.h. die Abweichung der Spin-Konfiguration von ihrem Mittelwert $\langle \sigma_i \rangle$ auf Gitterplatz i ist unabhängig von der Abweichung auf Gitterplatz j :

$$\langle (\sigma_i - \langle \sigma_i \rangle)(\sigma_j - \langle \sigma_j \rangle) \rangle \stackrel{\text{MF}}{\approx} 0 \quad (1.36)$$

Diese Gleichung kann man auch schreiben als (eine ähnliche Beziehung erhält man in der Hartree-Approximation für die Elektronendichten):

$$\langle \sigma_i \sigma_j \rangle \stackrel{\text{MF}}{=} \langle \sigma_i \rangle \langle \sigma_j \rangle. \quad (1.37)$$

Für ein homogenes System ist der Mittelwert auf allen Gitterplätzen gleich d.h. $\langle \sigma_i \rangle = \langle \sigma_j \rangle \equiv \langle \sigma \rangle = m$. Übertragen auf den Hamilton-Operator bedeutet die MF-Näherung folgende Vereinfachung ($\mu_B \equiv 1$)

$$\begin{aligned} \mathcal{H} &\stackrel{\text{Eq. (1.37)}}{=} -J \sum_{\langle ij \rangle} \sigma_i \sigma_j - B \sum_i \sigma_i \\ &\approx \mathcal{H}_{MF} = -J \sum_i \sigma_i \sum_{j \text{ NN. of } i} \langle \sigma \rangle - B \sum_i \sigma_i \\ &= -\underbrace{(B + qJ\langle \sigma \rangle)}_{B_{eff}} \sum_i \sigma_i. \end{aligned} \quad (1.38)$$

D.h. \mathcal{H} hat bei Anwendung von Glg. (1.37) den gleichen Energie-Erwartungswert wie \mathcal{H}_{MF} ; q ist hierbei die Koordinationszahl (# nächster Nachbarn). **Beachte:** \mathcal{H}_{MF} hängt von dem Spinerwartungswert $\langle \sigma \rangle$ ab, der mit Hilfe von \mathcal{H}_{MF} selbstkonsistent berechnet werden muss:

$$\langle \sigma \rangle = \sum_{\sigma=\pm 1} \sigma e^{\beta \sigma (B + qJ\langle \sigma \rangle)} / \sum_{\sigma=\pm 1} e^{\beta \sigma (B + qJ\langle \sigma \rangle)} \quad (1.39)$$

Statt dieser Gleichung können wir auch zunächst die Zustandssumme

$$\begin{aligned} Z &= \left(\sum_{\sigma_i=\pm 1} \exp \left(\sigma_i \frac{B + qJ\langle\sigma\rangle}{k_B T} \right) \right)^N \\ &= \left(2 \cosh \frac{B + qJ\langle\sigma\rangle}{k_B T} \right)^N \end{aligned} \quad (1.40)$$

berechnen. Deren Ableitung nach B liefert die Magnetisierung d.h.

$$m = \frac{M}{N} = \frac{1}{\beta} \frac{\partial Z}{\partial B} \frac{1}{N} = \langle\sigma\rangle = \tanh \frac{B + qJ\langle\sigma\rangle}{k_B T} \quad (1.41)$$

wie in Glg. (1.39). Abbildung 1.3 veranschaulicht die graphische Lösung dieser Gleichung. Für $k_B T_c < qJ$ ergeben sich Lösungen mit endlicher Magnetisierung.

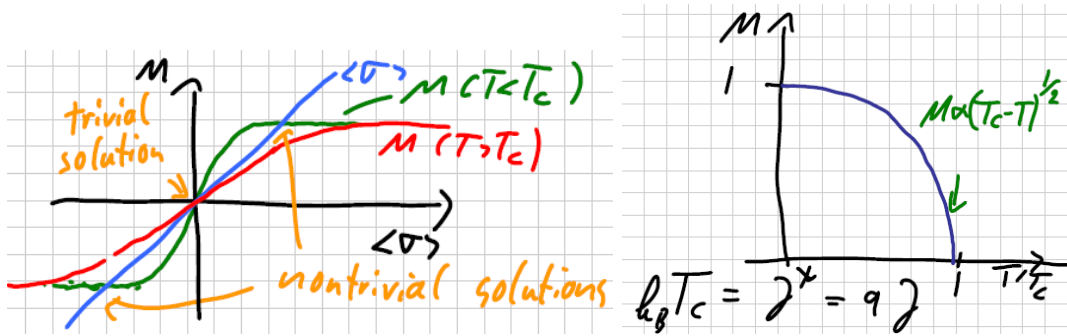


Abbildung 1.3: Links: Graphische „mean-field“ Lösung. Rechts: Magnetisierung als Funktion der Temperatur.

Beachte: In unendlichen Dimensionen d.h. für $d \rightarrow \infty$ oder für $q \rightarrow \infty$ wird die „mean-field“ Lösung exakt. Dies lässt sich mit Hilfe des Zentralen Grenzwertsatzes zeigen. Dieser besagt, dass Korrekturen zur mittleren Magnetisierung auf den q Nachbargitterplätzen wie $1/\sqrt{q}$ abnehmen. Daher kann für $q \rightarrow \infty$ die Spinkonfiguration auf allen Nachbargitterplätzen durch das Mittel M ersetzt werden.

Lösung in $d=1$

In einer Dimension hat bereits Ernst Ising das nach ihm benannte Modell gelöst. Durch eine einfache Variablentransformation ist dies möglich. Betrachten wir *offene Randbedingungen* (kein Magnetfeld) so haben wir:

$$\begin{aligned} \mathcal{H} &= -J \sum_{i=1}^{N-1} \sigma_i \sigma_{i+1} = -J \sum_{i=2}^N \sigma_{i-1} \sigma_i, \\ Z &= \sum_{\sigma_1=\pm 1} \sum_{\sigma_2=\pm 1} \dots \sum_{\sigma_N=\pm 1} e^{-\beta \mathcal{H}\{\sigma_i\}}. \end{aligned} \quad (1.42)$$

Der Trick ist nun, neue Variablen $\{s_i\}$ einzuführen, die wie folgt definiert sind:

$$s_1 = \sigma_1; \quad s_i = \sigma_i \sigma_{i-1} \text{ für } i \geq 2 \quad (1.43)$$

$$\Rightarrow \sigma_i = \prod_{j=1}^i s_j \Rightarrow \sigma_{i+1} \sigma_i = s_{i+1} \quad (1.44)$$

In den neuen Variablen $\{s_i\}$ nimmt der Hamilton-Operator die einfache Form

$$\mathcal{H} = -J \sum_{i=2}^N s_i \quad (1.45)$$

an. D.h. in den s_i ist jeder Gitterplatz unabhängig und damit lässt sich die Zustandssumme einfach berechnen als

$$\begin{aligned} Z &= \left(\sum_{s_1=\pm 1} \right) \left(\sum_{s_2=\pm 1} e^{-\beta J s_2} \right) \left(\sum_{s_3=\pm 1} e^{-\beta J s_3} \right) \dots \left(\sum_{s_N=\pm 1} e^{-\beta J s_N} \right) \\ &= 2(2 \cosh(\beta J))^{N-1} = 2^N [\cosh(\beta J)]^{N-1} \end{aligned} \quad (1.46)$$

Aus der Ableitung der Zustandssumme lassen sich nun alle thermodynamischen Größen bestimmen wie z.B. die Energie

$$\begin{aligned} E(\beta) &= -\frac{\partial \ln Z}{\partial \beta} = -(N-1)J \tanh(\beta J) \\ E(T) &= -(N-1)J \tanh\left(\frac{J}{k_B T}\right). \end{aligned} \quad (1.47)$$

Für $0 < T < \infty$ ist die Energie damit eine analytische Funktion und ∞ -oft differenzierbar. Daraus folgt direkt: Es gibt es keinen Phasenübergang bei endlicher Temperatur.

Ähnlich (mit Hilfe sogenannter Bindungstransfer-Matrizen) lässt sich auch der Fall periodischer Randbedingungen und einem Magnetfeld behandeln. Tatsächlich gibt es bei $T = 0$ einen Übergang zu einem vollständig polarisierten ($m = \pm 1$) Grundzustand. Aufgrund dieser Überlegungen haben Ising and Lenz das Modell als irrelevant für den Ferromagnetismus verworfen.

2d Quadratgitter

Wie bereits in Abschnitt 1.1 erwähnt löste Onsager 1944 das zweidimensionale Ising-Modell exakt; d.h. er berechnete die Zustandssumme und die spezifische Wärme des Ising-Modells auf dem Quadratgitter. Der Lösungsweg besteht aus einer Kombination von Hoch- und Tieftemperatur-Entwicklung [3] und benutzt, dass das duale (reziproke) Gitter des Quadratgitters wieder das Quadratgitter ist. Der etwas kompliziertere Lösungsweg soll hier nicht behandelt werden, wir fassen aber die wichtigsten Ergebnisse zusammen:

Für die kritische Temperatur ergibt sich

$$\frac{J}{k_B T_c} = \frac{1}{2} \operatorname{arcsinh}(1) = \frac{1}{2} \ln(\sqrt{2} + 1) \approx 0.4407 \quad (1.48)$$

bzw.

$$T_c \approx 2.2692 \frac{J}{k_B} . \quad (1.49)$$

Die kritischen Exponenten lauten:

$$\alpha = 0, \nu = 1, \beta = \frac{1}{8}, \gamma = \frac{7}{4}, \delta = 15 . \quad (1.50)$$

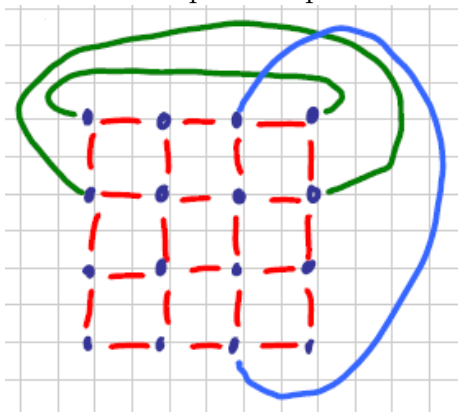
Beachte, im Gegensatz zum Ising-Modell kann das Heisenberg-Modell nur in einer Dimension exakt gelöst werden.

1.5 Monte-Carlo-Simulation des Ising-Modells

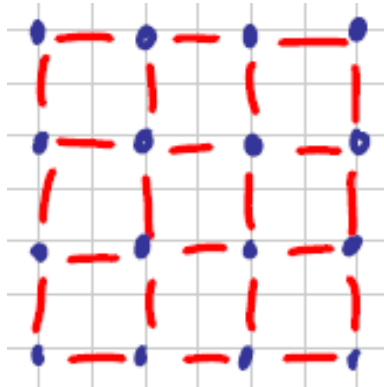
Randbedingungen

Wenn wir das Ising-Modell (1.1) auf einem endlichen Gitter mit Hilfe des Monte-Carlo-Verfahrens simulieren wollen, müssen wir Randbedingungen wählen. Im Folgenden sollen einige Randbedingungen kurz vorgestellt werden.

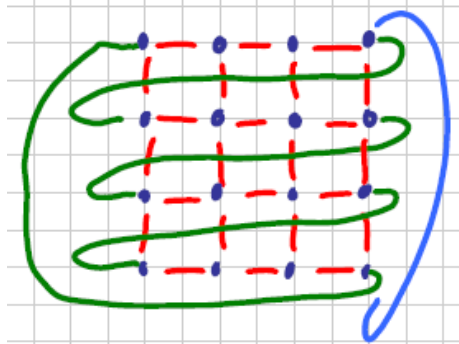
1. Konventionelle Wahl: Periodische Randbedingungen
 \Rightarrow alle Gitterplätze äquivalent



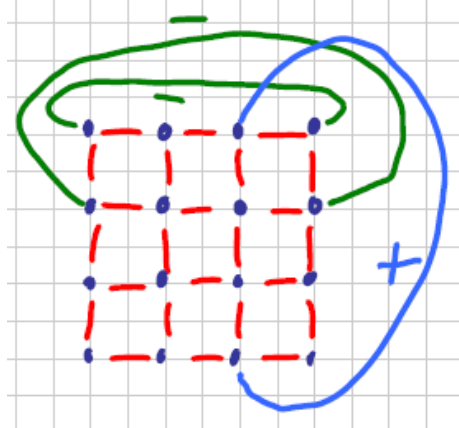
2. Anderes Extrem: offene Randbedingungen
 \Rightarrow innere Gitterplätze und Oberflächen Gitterplätze



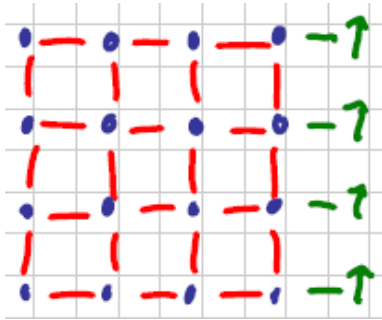
3. Verdrehte Randbedingungen: einfach in 1d Array zu realisieren



4. Antiperiodische Randbedingungen: entgegengesetztes Vorzeichen der Wechselwirkung entlang (einiger) Ränder
 \Rightarrow ungerade Anzahl an Domain-Wänden



5. Fixierte oder „mean-field“ Randbedingungen:
 Randplätze koppeln an externes Feld



Die verschiedenen Möglichkeiten können auch kombiniert/gemischt werden ...

Algorithmus

Für die Monte-Carlo-Integration bzw. -Simulation des Ising-Modells ergibt sich ein ähnlicher Algorithmus wie für die allgemeine Monte-Carlo-Integration auf S. 14. Der Hauptunterschied besteht darin, dass wir es nun mit diskreten Variablen (Spins ± 1) zu tun haben. Der Algorithmus ist besonders effizient, wenn sich die Konfigurationen x' und x nur um einen einzigen Spin (auf Gitterplatz i) unterscheiden („single-spin-flip“ Algorithmus). In diesem Fall ist die Berechnung von $r = p_{eq}(x')/p_{eq}(x)$ besonderes einfach und schnell, da lediglich Gitterplatz i und seine Nachbarn betrachtet werden müssen. Der Algorithmus ist damit wie folgt:

0. Wähle Anfangs-Spin-Konfiguration $x = \{\sigma_l\}$
1. Wähle Gitterplatz i , x' ist ident mit x außer dem entgegengesetzten Spin auf i : $\sigma_i \rightarrow -\sigma_i$
2. Berechne $\Delta E = E_{x'} - E_x$
3. Markov-Schritt:
 - Erzeuge Zufallszahl $rand \in [0, 1)$
 - wenn $rand < r = e^{-\frac{\Delta E}{k_B T}}$: flippe Spin ($\sigma_i \rightarrow -\sigma_i$) d.h. $x = x'$
 - sonst: behalte x bei
4. Nach den „warm-up sweeps“ messe Observablen (nach jedem „Mess-sweep“ nicht nach jedem „single-spin-flip“)³

$$\begin{aligned}
 n_{sum} &+ 1 \\
 m_{sum} &+ m_{\{\sigma_l\}} \\
 E_{sum} &+ E_{\{\sigma_l\}} \\
 &\vdots
 \end{aligned}
 \tag{1.51}$$
5. genug „sweeps“?
 - ja: Berechne Mittelwerte und ggf. Fehler
 - nein: zurück zu Schritt 1.

³Als einen „sweep“ bezeichnet man N (\equiv Anzahl der Gitterplätze) versuchte Spin-Flips. Erst nach einem „sweep“ ist eine weitestgehend unabhängige neue Konfiguration erzeugt worden (man kann auch eine genauere Analyse mit Hilfe der Autokorrelationszeit durchführen). Daher bietet es sich an die Rechenoperation zur Berechnung der Observablen, die erhebliche Computer-Zeit kosten, erst nach einem „sweep“ durchzuführen.

Kritische Temperaturen

Die folgende Tabelle fasst die kritischen Temperaturen des ferromagnetischen Ising-Modells mit nächst-Nachbar-Wechselwirkung zusammen. Die meisten Werte stammen aus [4].

Beachte:

- Es gibt Phasenübergänge für alle Gitter mit $d > 1$.
- $T_c \xrightarrow{q \rightarrow \infty} \frac{Jq}{k_B}$ wie in der „mean field“ Lösung.

dim	lattice	q	$\frac{k_B T_c}{J}$	$\frac{k_B T_c}{qJ}$
1	chain/ring	2	0	0
2	honeycomb	3	~ 1.52	~ 0.5
	square	4	2.269	0.57
	triangular	6	~ 3.64	~ 0.61
	diamond	4	~ 2.704	~ 0.68
3	cubic	6	~ 4.512	~ 0.75
	bcc	8	~ 6.35	~ 0.79
	fcc	12	~ 9.79	~ 0.82
	hypercubic	8	~ 6.68	~ 0.84
∞	“	∞	∞	1.0

Kritische Exponenten

Im Folgenden wollen wir auch kurz die kritischen Exponenten des Ising-Modells in drei Dimensionen angeben (aus [5]).

$$\begin{aligned}
 \alpha &= 0.110(1); & \beta &= 0.3265(3); & \gamma &= 1.2372(5); \\
 \delta &= 4.789(2); & \nu &= 0.6301(4); & \eta &= 0.0364(5);
 \end{aligned}$$

Zum Vergleich: in der „mean field“-Approximation haben wir : $\alpha = 0, \beta = \frac{1}{2}, \gamma = 1, \nu = \frac{1}{2}$. Diese „mean field“-Exponenten gelten auch allgemein für $d \geq 4$. Nochmals zur Wiederholung in $d = 2$: $\nu = 1, \beta = \frac{1}{8}, \gamma = \frac{7}{4}, \delta = 15$ und $\alpha = 0$ (logarithmische Divergenz).

1.6 „Finite-size scaling“

Ziel des „finite-size scaling“ ist es, die kritische Temperatur und auch das kritische Verhalten also insbesondere die kritischen Exponenten aus den numerischen Simulationen endlicher Gitter zu bestimmen, d.h. die Extrapolation zum thermodynamischen

Limes $N \rightarrow \infty$. Die besondere Schwierigkeit besteht darin, das singuläre Verhalten am Phasenübergang für $N \rightarrow \infty$ aus dem nicht singulären Verhalten bei endlichem N zu gewinnen.

Um die kritischen Exponenten genau zu berechnen, muss man sich eines grundlegenden Konzepts der Theoretischen Physik bedienen, das mit den Namen *Renormierungstheorie*, *Skaleninvarianz* und *Universalität* verknüpft ist. Dieses geht insbesondere auf Wilson zurück, dessen Arbeiten [6] zu einem wesentlich besserem Verständnis von Phasenübergängen führten und mit dem Nobelpreis für Physik ausgezeichnet wurden. Wir können diese Konzepte hier nur kurz anreißen, aber nicht wirklich herleiten und verweisen auf weiterführende Literatur z.B. [7]. Dieses Kapitel ist nicht prüfungsrelevant für EDV2 und wird in einer extra Vorlesung behandelt.

1.6.1 Renormierungsgruppe, Skaleninvarianz und Universalität

Bei der **Renormierungstheorie** betrachtet man einen Hamilton-Operator wie z.B. das Ising-Modell auf $N = L \times L$ Gitterplätzen

$$\mathcal{H}^N(J) = -J \sum_{\langle ij \rangle} \sigma_i \sigma_j \quad (1.52)$$

und untersucht die (wiederholte) Abbildung (Gruppentransformation) auf einen neuen Hamilton-Operator mit weniger Freiheitsgraden z.B. auf $N/4 = L/2 \times L/2$ Gitterplätzen.

$$\mathcal{H}^N(J) \xrightarrow{N \rightarrow N/4} \mathcal{H}^{N/4}(J') \xrightarrow{N/4 \rightarrow N/16} \mathcal{H}^{N/16}(J'') \dots \quad (1.53)$$

Man kann sich dies z.B. so vorstellen, dass man einen Block von 4 Spins durch einen einzigen neuen Spin im Modell mit weniger Gitterplätzen ersetzt. Im Allgemeinen wird der Hamilton-Operator mit weniger Freiheitsgraden komplizierter (nicht nur J ; nicht nur Spin up/down) sein müssen, um zumindest die Niederenergiephysik korrekt zu beschreiben. In der Nähe von Phasenübergängen sind aber oftmals nur ganz bestimmte Wechselwirkungen für das kritische/singuläre Verhalten relevant (z.B. die ferromagnetische Kopplung). Durch die Verkleinerung des Systems ändert sich diese Kopplung, was man durch eine Differentialgleichung für J beschreiben kann, die typischerweise in folgender Form geschrieben wird:

$$\frac{dJ}{d \ln N} = \beta(J) \quad (1.54)$$

wobei die Skalierungsfunktion $\beta(J)$ von der Art des betrachteten Problems abhängt. Im thermodynamischen Limes mit ∞ -vielen Renormierungsschritten wird J immer mehr ab- oder zunehmen und gegen einen sogenannten Fixpunkt $J \rightarrow J_{\text{fix}}$ konvergieren. Gegen welchen Fixpunkt wir konvergieren, hängt vom Startwert, also dem J des untersuchten Ising-Modells, ab. Im Ising-Modell gibt es die folgenden Fixpunkte (man beachte, die neben J einzig andere Energieskala ist die Temperatur, die wir o.b.d.A. $T \equiv 1$ setzen können, da die Physik nur von J/T abhängt):

- $J_{\text{fix}} = 0$: paramagnetische Phase; die Spins sind unabhängig, es gibt nur thermische Fluktuationen. Ising-Modelle deren J gegen $J_{\text{fix}} = 0$ konvergieren zeigen zwar auf kleineren Längenskalen Spin-Korrelationen aufgrund $J > 0$. Auf größeren Längenskalen nimmt das effektive J aber immer mehr ab und konvergiert gegen $J_{\text{fix}} = 0$. Das bedeutet, dass größere Blöcke an Spins untereinander nicht mehr korreliert sind (mit $J_{\text{fix}} = 0$ wechselwirken).
- $J_{\text{fix}} = \infty$: ferromagnetische Phase; die Spins sind parallel ausgerichtet.
- $J_{\text{fix}} = J_{\text{critical}}$:
 $\forall J > J_{\text{critical}}$ nimmt J immer weiter zu und konvergiert gegen $J_{\text{fix}} = \infty$;
 $\forall J < J_{\text{critical}}$ nimmt J immer weiter ab und konvergiert gegen $J_{\text{fix}} = 0$.
Daneben gibt es genau einen Punkt J_{critical} für den J weder zu- noch abnimmt, für dieses J_{critical} befindet sich das Ising-Modell am Phasenübergang zwischen paramagnetischer und ferromagnetischer Phase.

Skaleninvarianz: Aus den obigen Überlegungen sehen wir, dass das Ising-Modell für die kritische Kopplungsstärke J_{critical} skaleninvariant ist. Die Kopplung zwischen sehr großen Spin-Blöcken auf großen Längenskalen (nach einigen Renormierungsschritten) ist die gleiche wie die zwischen den ursprünglichen Spins auf kleinen Längenskalen nämlich J_{fix} . D.h. das physikalische Verhalten z.B. die Spin-Spin-Korrelationsfunktion

$$\langle \sigma_i \sigma_j \rangle \quad (1.55)$$

ist auf kleinen und großen Längen-Skalen gleich. Ein bekanntes skaleninvariantes Objekt ist ein Fraktal, das auf allen Längenskalen gleich aussieht. Das gleiche gilt für die Korrelationsfunktion des Ising-Modells am Fixpunkt.

Gehen wir nun vom Fixpunkt (kritischen Punkt) zu seiner unmittelbarer Nähe, so kann die Korrelationsfunktion durch eine Korrelationslänge ξ beschrieben werden

$$\langle \sigma_i \sigma_j \rangle \sim e^{-|i-j|/\xi}. \quad (1.56)$$

Die Korrelationslänge divergiert am kritischen Punkt $\xi \xrightarrow{J \rightarrow J_{\text{critical}}} \infty$.

Universalität bedeutet wiederum, dass viele Modelle in der Nähe des kritischen Punktes das gleiche kritische Verhalten insbesondere die gleichen kritischen Exponenten haben (auch ist das Verhalten der β -Funktion, Glg. (1.54) in der Nähe des entsprechenden J_{critical} gleich). Es wird allgemein davon ausgegangen (alle bislang gewonnenen Ergebnisse sprechen dafür), dass alle Modelle mit der gleichen Symmetrie des Ordnungsparameters und in der gleichen Dimension die gleichen kritischen Exponenten haben.

Die Hypothese für das **singuläre Verhalten der Freien Energie** an einem Phasenübergang 2. Ordnung ist nun, dass dieses nur von der *Korrelationslänge* ξ und *nicht* mehr von mikroskopischen Längen L_0 des Modells wie z.B. der Gitterdistanz, auf der die Wechselwirkung J wirkt, abhängt (nach ein paar Renormierungsgruppenschritten

liegt diese Information nicht mehr vor). Die numerischen Ergebnisse für ein hyperkubisches Gitter mit $N = L^d$ Plätzen ($d = 2$ für Quadratgitter) hängen daher nur vom Verhältnis Gesamtgröße(länge) des untersuchten Modells zur Korrelationslänge, $\frac{L}{\xi}$, ab. Die Korrelationslänge ξ hängt wiederum für fixes J von T ab (Hier und im Folgenden setzen wir $J \equiv 1$ statt wie oben $T \equiv 1$. Beides ist möglich, da nur das Verhältnis T/J relevant ist.). Auf Basis von Wilsons Renormierungsgruppentheorie können wir daher davon ausgehen, dass in führender Ordnung in $1/L$ der singuläre („s“) Teil der Freien Energie nur von $L/\xi(T)$ abhängt:

$$f^{(s)}(L, T) = \frac{1}{V} F^{(s)}(L, T) \approx \frac{1}{V} \tilde{\Psi}\left(\frac{L}{\xi(T)}\right), \quad \text{mit} \quad (1.57)$$

$$\xi(T) = \xi_0 \epsilon^{-\nu}; \quad \epsilon = \left|1 - \frac{T}{T_c}\right|$$

Letztere Gleichung beschreibt die Divergenz der Korrelationslänge am Phasenübergang mit kritischem Exponenten ν . Dies erlaubt die Umformung der dimensionslosen Länge:

$$\frac{L}{\xi} = \xi_0^{-1} \epsilon^\nu L. \quad (1.58)$$

Wenn wir die mikroskopische Längenskala L_0 einführen, ergibt sich hieraus direkt:

$$\left(\frac{L}{\xi} \frac{\xi_0}{L_0}\right)^{\frac{1}{\nu}} = \epsilon \left(\frac{L}{L_0}\right)^{\frac{1}{\nu}} \quad (1.59)$$

Alle Exponenten und die Abhängigkeit $\tilde{\Psi}$ von L/ξ bzw. von $\epsilon(L/L_0)^{\frac{1}{\nu}}$ sind universell, d.h. hängen nur von Dimension und Symmetrie des Ordnungsparameters ab. Ableitungen der freien Energie bzw. von $\tilde{\Psi}$ erlauben es nun, auch entsprechende Skalierungsgleichungen für die Observablen zu bestimmen (mit $L_0 \equiv 1$):

$$\begin{aligned} m(L, T) &= \tilde{m}(\epsilon L^{\frac{1}{\nu}}) L^{-\frac{\beta}{\nu}} \\ \chi(L, T) &= \tilde{\chi}(\epsilon L^{\frac{1}{\nu}}) L^{\frac{\gamma}{\nu}} \\ C(L, T) &= \tilde{C}(\epsilon L^{\frac{1}{\nu}}) L^{\frac{\alpha}{\nu}} \end{aligned} \quad (1.60)$$

Hierbei treten die kritischen Exponenten aus Glg. (1.16) auf. Mit Hilfe von Renormierungsgruppenmethoden lassen sich auch Beziehungen zwischen den kritischen Exponenten herleiten:

$$\begin{aligned} \alpha + 2\beta + \gamma &= 2 & \text{Rushbrooke} & \quad \gamma = \beta(\delta - 1) & \text{Widom} \\ d\nu &= 2 - \alpha & \text{Josephson} & \quad \gamma = \nu(2 - \eta) & \text{Fisher} \end{aligned}$$

Beachte:

1. Die Skalengesetze gelten nur asymptotisch für $\epsilon \rightarrow 0$ und $B \rightarrow 0$.
In der Praxis können Korrekturen bei endlichem ϵ sehr signifikant sein.
2. Im allgemeinen gibt es auch noch einen weiteren, regulären Anteil der Freien Energie, der aber am Phasenübergang nicht divergiert.

1.6.2 Anwendung der Skalierung für das „finite-size scaling“

Eine praktische Anwendung der Skalengesetze (1.60) besteht darin, sich diese für das „finite-size scaling“ zunutze zu machen. Definieren wir

$$\tilde{m}_L(x \equiv \epsilon L^{\frac{1}{\nu}}) \equiv m(L, T(x, L)) L^{\frac{\beta}{\nu}}, \quad (1.61)$$

wobei $m(L, T(x, L))$ die bei L und $T = (\epsilon + 1)T_c = (x/L^{\frac{1}{\nu}} + 1)T_c$ gemessene (simulierte) Magnetisierung ist. Dieses $\tilde{m}_L(x)$ konvergiert für $L \rightarrow \infty$ gegen die universelle Kurve $\tilde{m}(x)$ (wir haben lediglich Glg. (1.60) umgeschrieben)

$$\lim_{L \rightarrow \infty} \tilde{m}_L(x) = \tilde{m}(x) \quad (1.62)$$

D.h. für L groß genug kollabieren alle Kurven $\tilde{m}_L(x)$ auf eine einzige universelle Kurve $\tilde{m}(x)$. Ein solches Kollabieren von experimentellen oder am Computer berechneten Kurven macht man sich oftmals beim Untersuchen bzw. beim Nachweis von universellem Verhalten zu nutze.

Das **Problem** dabei ist, dass für eine solche Untersuchung ϵ also T_c (was nicht universell ist) bereits bekannt sein muss. Auch die Exponenten β sind oftmals nicht oder nicht genau bekannt. Die **Lösung** dieses Problems ist es nun, Observablen zu bilden, die mit L nicht renormiert werden. Mit

$$\langle M^2 \rangle \propto (\underbrace{L^d L^{-\frac{\beta}{\nu}}}_{M=L^d m})^2 \text{ und } \langle M^4 \rangle \propto (L^d L^{-\frac{\beta}{\nu}})^4 \quad (1.63)$$

wird der Quotient

$$\frac{\langle M^4 \rangle}{\langle M^2 \rangle^2} \propto (L^{d-\frac{\beta}{\nu}})^{4-2 \cdot 2} = L^0 \quad (1.64)$$

nicht renormiert. Wir können diesen Quotienten oder die **Binder Kumulante**

$$U_4 = 1 - \frac{\langle m^4 \rangle}{3\langle m^2 \rangle^2} \quad (1.65)$$

bilden und $U_4(T)$ für verschiedene L plotten. Diese Kurven kreuzen sich asymptotisch (d.h. für $L \rightarrow \infty$) bei $T = T_c$. Das asymptotische Verhalten ist

$$U_4 \xrightarrow{L \rightarrow \infty} \begin{cases} \frac{2}{3} & \text{für } T < T_c \\ U^* \approx 0.61 & \text{für } T = T_c \\ 0 & \text{für } T > T_c \end{cases} \quad (1.66)$$

Dies erlaubt eine genaue Bestimmung der kritischen Temperatur, s. Abbildung 1.4.

Sobald T_c bekannt ist, lassen sich die kritischen Exponenten bestimmen. Nach den Skalengesetzen (1.60) ist die Magnetisierung für $T = T_c$ gegeben durch

$$m(L, T_c) = \tilde{m}(0) L^{-\frac{\beta}{\nu}}. \quad (1.67)$$

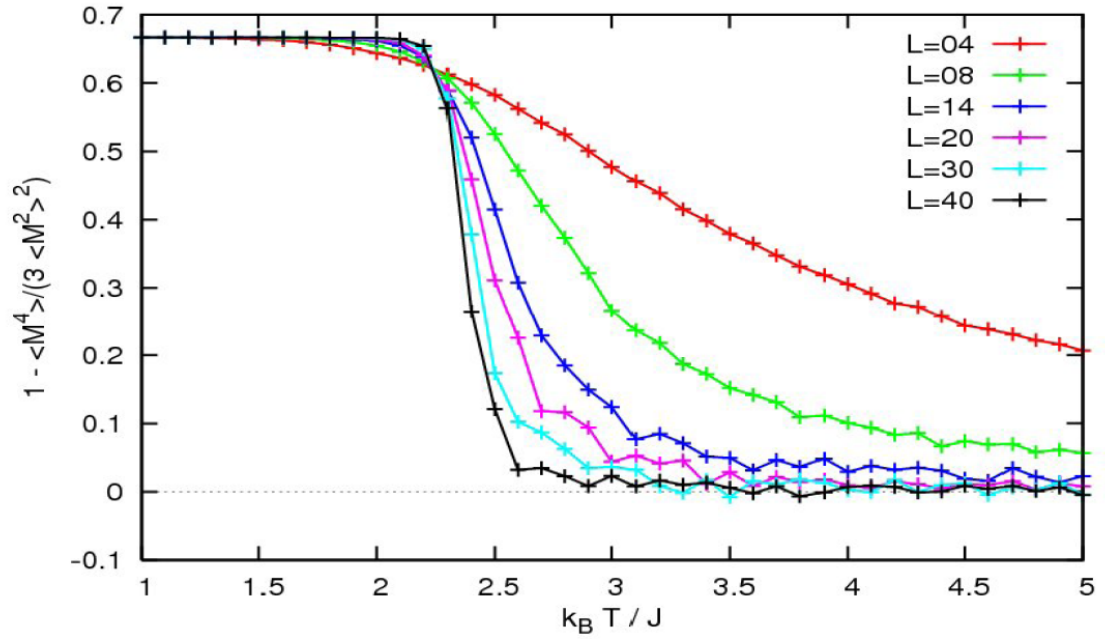
Binder's cumulant (10^5 sweeps)

Abbildung 1.4: Binder-Kumulanten vs. Temperatur. Die Kurven für verschiedene Systemgrößen kreuzen sich bei der kritischen Temperatur T_c .

Das bedeutet

$$\log m(L, T_c) \sim -\frac{\beta}{\nu} \log(L) \quad (1.68)$$

und der Quotient β/ν folgt durch einen einfachen (doppelt) logarithmischen Plot s. Abbildung 1.5.

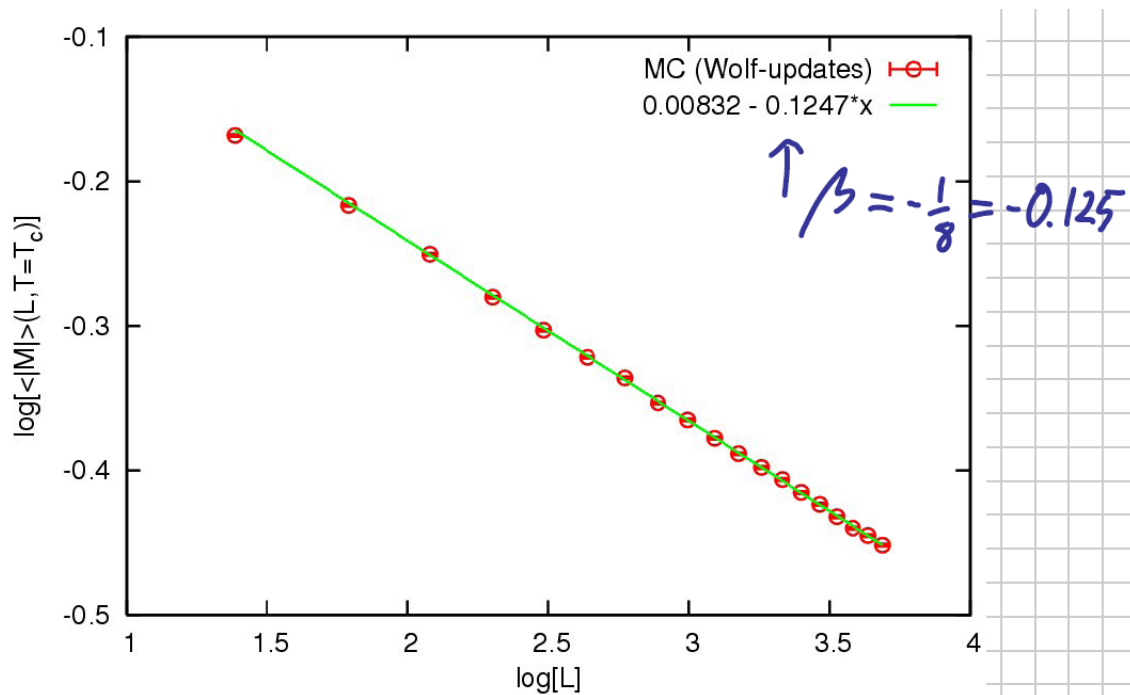


Abbildung 1.5: Berechnung des kritischen Exponenten β bzw. β/ν (beachte $-\beta = -\beta/\nu = -\frac{1}{8}$, da $\nu = 1$ für das 2D Ising-Modell.)

Literaturverzeichnis

- [1] E. Ising, PhD Thesis, Universität Hamburg (1924).
- [2] L. Onsager, Phys. Rev. **65**, 117 (1944).
- [3] H. A. Kramers, G.H . Wannier, Phys. Rev. **60**, 252 (1941).
- [4] P. Meyer, PhD Thesis, University of Derby (2000).
- [5] A. Pelissetto, E. Vicari, Physics Reports **368**, 549 (2002).
- [6] K. Wilson, Phys. Rev. B, **4**, 3174 (1971).
- [7] K. Wilson, Phys. Mod. Phys., **47**, 773 (1975).