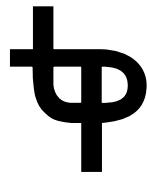


# **Fluktuationen kritischer Grenzflächen auf verschiedenen Größenskalen**

als Diplomarbeit vorgelegt von  
Melanie Müller

Januar 2004



**institut für  
theoretische physik**

Westfälische Wilhelms-Universität Münster

Man sagt, die Liebe kenne keine Grenzen.  
Aber die Grenzen sind gerade das Interessante.

*Jean-Luc Godard*

# Inhaltsverzeichnis

<b>Einleitung</b>	<b>iii</b>
0.1 Grenzflächen und kritische Phänomene: Historisches . . . . .	iii
0.2 Überblick über die Arbeit . . . . .	vii
<b>I Theorie: Beschreibung von Grenzflächen</b>	<b>1</b>
<b>1 Ising-Modell</b>	<b>2</b>
<b>2 Mean-field-Theorie</b>	<b>4</b>
2.1 Landau-Theorie . . . . .	4
2.1.1 Landau-Freie Energiedichte und kritische Phänomene . .	4
2.1.2 Modellierung der Grenzfläche durch Randbedingungen .	6
2.2 $\phi^4$ -Theorie . . . . .	8
2.2.1 Mikroskopische Landau-Theorie . . . . .	8
2.2.2 Äquivalenz zur Quantenfeldtheorie . . . . .	9
2.2.3 Erzeugende Funktionale . . . . .	10
2.3 Intrinsisches Profil der $\phi^4$ -Theorie . . . . .	12
2.3.1 Schleifenentwicklung . . . . .	12
2.3.2 Nullte Ordnung: Landau-Theorie . . . . .	13
2.3.3 Erste Ordnung nach Küster . . . . .	14
2.4 Fluktuationen in Landau- und $\phi^4$ -Theorie . . . . .	18
<b>3 Kapillarwellen-Theorie</b>	<b>21</b>
3.1 Kapillarwellen-Energie . . . . .	21
3.2 Verteilung der Grenzflächen-Positionen . . . . .	23
3.3 Grenzflächenprofil . . . . .	24
<b>4 Faltungsnäherung</b>	<b>25</b>
4.1 Gesamtprofil . . . . .	25
4.2 Grenzverhalten . . . . .	27
4.3 Einfluss der Kapillarwellen auf die Profilform . . . . .	28
<b>5 Grenzflächendicke</b>	<b>29</b>
5.1 Definition der Grenzflächendicke . . . . .	29
5.1.1 ad hoc-Definitionen . . . . .	29
5.1.2 Definition als zweites Moment . . . . .	30

5.1.3	Vergleich der Definitionen . . . . .	34
5.2	Dicke in 1-Loop-Ordnung . . . . .	35
<b>II</b>	<b>Monte-Carlo-Simulation: Grenzflächen im Ising-Modell</b>	<b>39</b>
<b>6</b>	<b>Ziel und Methode</b>	<b>40</b>
6.1	Theoretische Vorhersage . . . . .	40
6.2	Ziel und Methode . . . . .	42
<b>7</b>	<b>Messverfahren und Messgrößen</b>	<b>45</b>
7.1	Blocking . . . . .	46
7.2	Lokale Magnetisierungsprofile . . . . .	47
7.3	Lokale Grenzflächenposition und -richtung . . . . .	48
7.4	Verteilung der Grenzflächenpositionen . . . . .	55
7.5	Verschieben der lokalen Magnetisierungsprofile . . . . .	58
7.6	Lokale gemittelte Profile . . . . .	59
7.7	Gradientenanalyse . . . . .	61
<b>8</b>	<b>Simulation und Auswertung</b>	<b>65</b>
8.1	Wolff-Algorithmus . . . . .	65
8.2	Autokorrelation . . . . .	67
8.3	Equilibrierung . . . . .	69
8.4	Testen auf Normalverteilung . . . . .	71
8.5	Fehlerrechnung: Binning . . . . .	72
<b>9</b>	<b>Ergebnisse</b>	<b>75</b>
9.1	Parameter . . . . .	75
9.2	Verteilung der Grenzflächenpositionen . . . . .	76
9.2.1	Verteilung und Momente . . . . .	76
9.2.2	Untersuchung der Varianz . . . . .	81
9.2.3	Test auf Normalverteilung . . . . .	82
9.3	Grenzflächen-Profile . . . . .	83
9.4	Dicke der Grenzflächen . . . . .	90
9.4.1	Dicken bei $t = -0,01$ . . . . .	90
9.4.2	Dicken bei $t = -0,05$ und $t = -0,004$ . . . . .	99
9.4.3	Dicken in universeller Form . . . . .	99
<b>10</b>	<b>Vergleich mit anderen Monte-Carlo-Simulationen</b>	<b>105</b>
<b>11</b>	<b>Mögliche Erweiterungen der Theorien</b>	<b>107</b>
<b>12</b>	<b>Zusammenfassung</b>	<b>109</b>

# Einleitung

## 0.1 Grenzflächen und kritische Phänomene: Historisches

Grenzflächen zwischen zwei verschiedenen Stoffen oder zwei verschiedenen Phasen sind ein alltägliches Phänomen. Schon Aristoteles beschäftigte sich daher mit der Frage, was eine Grenzfläche sei und definierte sie als „den letzten Punkt eines Dinges, jenseits dessen es kein Teil des Dinges gibt, diesseits dessen alle Teile des Dinges sind“ [Me99]. Für Aristoteles sind Grenzflächen folglich **scharf**, wie sie uns auch meist erscheinen, wenn wir sie mit dem Messinstrument „Auge“ betrachten.

Diese Vorstellung eines abrupten Übergangs zwischen den zwei Phasen auf den beiden Seiten der Grenzfläche dominierte bis ins 19. Jahrhundert die Grenzflächen-Physik. Erst im Jahre 1831 bemerkte Poisson, dass eine Grenzfläche ein diffuser, kontinuierlicher Übergang ist, der mit einem **stetigen Grenzflächenprofil**  $\phi(x)$  beschrieben werden sollte. Dabei ist  $\phi(x)$  z. B. die Differenz der Dichten der beiden Phasen, die sich in der Grenzschicht kontinuierlich verändert.

Bis zum Ende des 19. Jahrhunderts fand die Beschreibung von Grenzflächen im Rahmen **molekularer Mechanik** statt. Die Eigenschaften der Grenzfläche wurden dabei berechnet über eine mechanisch-statische Betrachtung, bei der sich die Moleküle in Ruhe in Minima potenzieller Energie befinden.

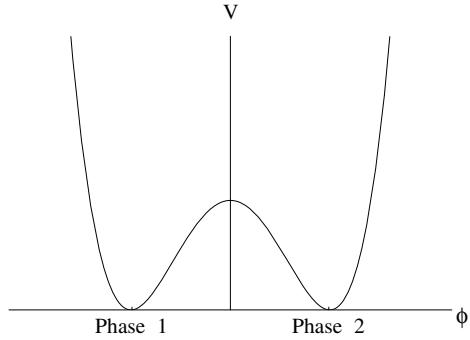
Dies ist essenziell verschieden von der heutigen, **thermodynamischen** Betrachtungsweise, die für Grenzflächen 1893 von **van der Waals** [vdW93] eingeführt wurde. Dort erweiterte er die mit der nach ihm benannten Gleichung verknüpfte thermodynamische Theorie für Zwei-Phasen-Systeme auf Grenzflächen. Aus Betrachtung intermolekularer Kräfte und einer Taylor-Entwicklung erhielt er eine Freie Energiedichte für das stetige Grenzflächenprofil  $\phi(x)$ :

$$\mathcal{L}(\phi(x)) = \frac{1}{2} (\partial\phi(x))^2 + V(\phi(x)),$$

deren Minimum das Grenzflächenprofil im thermodynamischen Gleichgewicht bestimmt.

Der Ableitungsterm  $\frac{1}{2} (\partial\phi(x))^2$  „bestraf“ zu abrupte Sprünge der Dichte  $\phi$  mit einer hohen Freien Energie, so dass sich die Dichte kontinuierlich ändert. Damit hat die Grenzfläche eine endliche Dicke.

Das Potenzial  $V$  hat typischerweise eine Form wie in nebenstehender Abbildung: Es weist zwei Minima auf, die den zwei homogenen Phasen entsprechen. In der Beschreibung eines Zwei-Phasen-Systems ohne Grenzfläche wird der „Buckel“ zwischen diesen zwei Minima mittels der Maxwell-Konstruktion durch eine Gerade ersetzt, so dass das Potenzial konvex wird. Van der Waals bemerkte jedoch in [vdW93], dass man zur Beschreibung einer Grenzfläche keine Maxwell-Konstruktion durchführen darf, da das Verhalten des Potenzials zwischen den zwei Minima die Werte der Freien Energie für Dichten  $\phi$  in der Grenzschicht angibt. Diese Werte müssen höher liegen als die Gleichgewichtswerte der homogenen Phasen, da die Dichten in der Grenzschicht global nicht stabil wären.



Eine zu van der Waals' Theorie äquivalente Beschreibung von Grenzflächen wurde 1937 von **Landau** [La37] in anderem Zusammenhang verwendet, nämlich zur Beschreibung von Systemen in der Nähe des kritischen Punktes. An einem kritischen Punkt findet ein Phasenübergang zweiter Ordnung statt, bei dem das System übergeht von einem Zwei-Phasen-Zustand in einen homogenen Zustand mit nur einer Phase. Dies wurde zum ersten Mal 1821 von de La Tour an Kohlendioxid beobachtet. Landau erkannte 1937, dass das wesentliche Element dieses Phasenübergangs der Wechsel der Symmetrie des Systems ist und durch eine diese Symmetrie beschreibende Größe charakterisiert werden kann: den **Ordnungsparameter**  $\phi$ . Unterhalb des kritischen Punktes ist der Ordnungsparameter  $\phi \neq 0$ , womit er die Symmetrie des Systems spontan bricht; oberhalb des kritischen Punktes ist der Ordnungsparameter  $\phi = 0$  und respektiert so die Symmetrie des Systems. Dabei ist der Übergang kontinuierlich, d. h. am kritischen Punkt hat der Ordnungsparameter einen stetigen Nulldurchgang.

Ein Beispiel für den Ordnungsparameter ist die spontane Magnetisierung eines Ferromagneten, der unterhalb einer kritischen Temperatur  $T_c$  ferromagnetisch (endliche spontane Magnetisierung), oberhalb von  $T_c$  aber paramagnetisch ist (keine spontane Magnetisierung). Ein weiteres Beispiel ist die Dichte-Differenz zwischen Flüssigkeit und Gas eines Stoffes oder die Dichte-Differenz zwischen zwei verschiedenen Flüssigkeiten. Unterhalb der kritischen Temperatur existiert ein Zwei-Phasen-Bereich, in dem die Dichte-Differenz von Null verschieden ist; oberhalb der kritischen Temperatur gibt es nur noch eine Phase, und die Dichte-Differenz ist Null. Diese Art von Systemen hatte van der Waals bei seiner Beschreibung eines Zwei-Phasen-Systems im Sinn.

Landau erhielt für den Ordnungsparameter  $\phi$  eine ähnliche Freie Energiedichte  $\mathcal{L}(\phi(x))$  wie van der Waals, allerdings über eine andere Motivation. Zur Festlegung von  $\mathcal{L}(\phi(x))$  verwendete er nur wenige allgemeine Postulate über Analytizität und Symmetrie, so dass die resultierende Freie Energiedichte (und damit das Verhalten des Systems) nur abhängt von der Symmetrie des Ordnungsparameters, der Raumdimension und der Art des kritischen Punktes, nicht jedoch von speziellen Eigenschaften des Systems wie von der Form

der Hamilton-Funktion, vom Gittertyp, vom Wert der Kopplungen etc. Ursache dieser **Universalität** ist das Auftreten **kritischer Fluktuationen** in der Nähe des kritischen Punktes, d. h. Fluktuationen auf allen Größenskalen, die mikroskopische Details vollständig überdecken. Durch Taylor-Entwicklung um den kritischen Punkt erhielt Landau die Freie Energiedichte

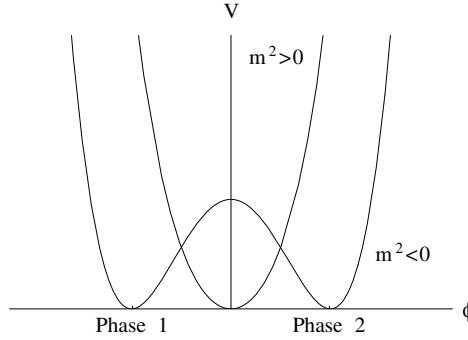
$$\mathcal{L}(\phi(x)) = \frac{1}{2} (\partial\phi(x))^2 + V(\phi(x))$$

mit dem  $\phi^4$ -Potenzial

$$V(\phi) = \frac{g}{4!} \phi^4 + \frac{m^2}{2} \phi^2 + C.$$

In der Entwicklung werden nur gerade Potenzen zugelassen, da keine Vorzugsrichtung ausgezeichnet ist; die Entwicklung bis zur vierten Potenz ist die niedrigste Ordnung, die die Beschreibung eines Phasenübergangs ermöglicht.  $g$ ,  $m$  und  $C$  sind Parameter, wobei das Vorzeichen von  $m^2$  den Phasenübergang steuert, vgl. die nebenstehende Abbildung. Für  $m^2 < 0$  ergibt sich ein Potenzial wie in van der Waals' Theorie zur Beschreibung von Grenzflächen und somit einen Zwei-Phasen-Bereich.

Für  $m^2 > 0$  liegt nur ein Potenzialminimum und somit nur eine homogene Phase vor.



In der Nähe des kritischen Punktes zeigt das System spektakuläre **kritische Phänomene**. Die Korrelationslänge  $\xi$  divergiert, und es treten Fluktuationen auf allen Größenskalen auf. Diese korrelierten Dichte-Fluktuationen bewirken bei Bestrahlung mit Licht starke, multiple Streuung, was eine ansonsten durchsichtige Flüssigkeit in der Nähe des kritischen Punktes milchig aussehen lässt (kritische Opaleszenz). Nähert man sich der kritischen Temperatur von unten, d. h. aus dem Zwei-Phasen-Bereich, und mit einer Grenzfläche im System, so wird die Oberflächenspannung immer kleiner, während gleichzeitig die Grenzflächendicke divergiert. Bei Erreichen des kritischen Punktes schließlich ist die Oberflächenspannung Null und die Grenzflächendicke unendlich, was dem Vorhandensein nur noch einer Phase entspricht.

Ein häufig verwendetes Modell zur numerischen Untersuchung von Grenzflächen und kritischen Phänomenen ist das **Ising-Modell**, ein vereinfachtes Modell eines Ferromagneten. Aufgrund des universellen Verhaltens in der Nähe des kritischen Punktes gelten die Ergebnisse dieser Untersuchungen auch für andere Systeme in derselben Universalitätsklasse, d. h. mit derselben Symmetrie und Dimension wie das betrachtete Ising-Modell. Die berühmte Onsager-Lösung des zweidimensionalen Ising-Modells im Jahr 1944 erschütterte jedoch den quantitativen Aspekt der Landau-Theorie, da sie eine Singularität der Freien Energie am kritischen Punkt lieferte, wohingegen die Landau-Theorie gerade auf der

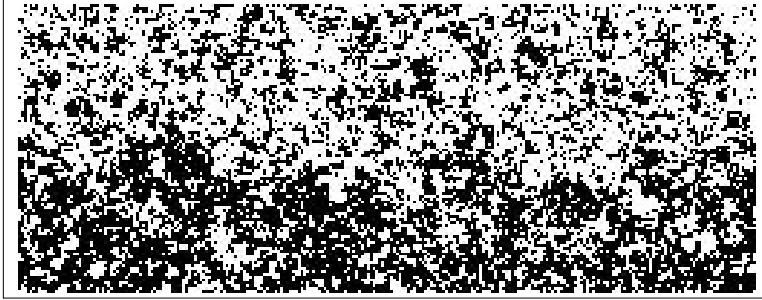


Abb. 1: Momentaufnahme der Grenzfläche im Ising-Modell bei einer Temperatur von  $0.99T_c$ . Die Up-Spins sind weiß, die Down-Spins schwarz dargestellt.

Analytizität der Freien Energie am kritischen Punkt basiert. Diese Diskrepanz wurde 1960 von Ginzburg aufgelöst mit der Erkenntnis, dass die Landau-Theorie als **Mean-field-Näherung** wichtige Fluktuationen vernachlässigt, die bei Annäherung an den kritischen Punkt immer weiter wachsen und schließlich das System-Verhalten dominieren.

Zur Beschreibung kritischer Phänomene müssen also mehr Fluktuationen als in der Landau-Theorie berücksichtigt werden. Die naheliegendste Erweiterung der Landau-Theorie ist die  **$\phi^4$ -Theorie**, in der über alle Konfigurationen des Ordnungsparameters integriert wird, gewichtet mit dem Boltzmann-Faktor der Landau-Energie:

$$Z = \int \mathcal{D}\phi(x) e^{-\beta \int dx \mathcal{L}(\phi(x))}$$

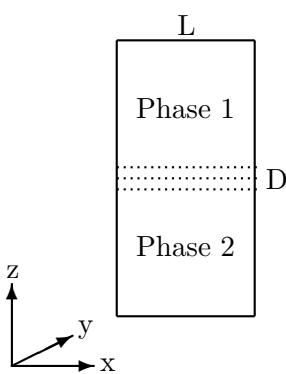
Die  $\phi^4$ -Theorie ist zwar nicht geschlossen analytisch lösbar, liefert aber in Näherungen und numerischen Rechnungen Korrekturen zur Landau-Theorie.

Ein Modell, das speziell die langwelligen Fluktuationen von Grenzflächen berücksichtigt und den Vorteil analytischer Lösbarkeit bietet, ist die **Kapillarwellen-Theorie**, die 1965 von Buff, Lovett und Stillinger eingeführt wurde [BLS65]. Sie betrachteten die Grenzfläche nicht mehr als Ordnungspараметer  $\phi$ , sondern als schwingende Membran, zu deren Verformung Energie gegen die Oberflächenspannung aufgewendet werden muss. Die Fluktuationen der Membran liefern wiederum ein stetiges Grenzflächenprofil  $\phi$ , dessen Dicke im Gegensatz zum van der Waals- oder Landau-Profil aber die charakteristische Eigenschaft hat, mit der Systemgröße zuzunehmen.

Die Betrachtung der Grenzfläche als Membran ist eine makroskopische Beschreibung der Grenzfläche auf großen Längenskalen, die mikroskopische Details und überhaupt jede innere Struktur der Grenzschicht, wie sie etwa das intrinsische Profil der Mean-field-Theorie darstellt, vernachlässigt. Dabei ist das Konzept der Unterscheidung zwischen „**intrinsischer**“ und „**makroskopischer**“ Struktur der Grenzfläche außerhalb einer gegebenen Theorie unklar. Dies wird z.B. an Abb. 1 deutlich, in der die Momentaufnahme einer Grenzfläche eines numerisch simulierten Ising-Modells in der Nähe der kritischen Temperatur gezeigt ist.

## 0.2 Überblick über die Arbeit

In dieser Arbeit wird versucht, die Unterscheidung von intrinsischer und makroskopischer Struktur einer Grenzfläche in der Nähe des kritischen Punktes (wie sie in Abb. 1 zu sehen ist) herauszuarbeiten. Besonderes Augenmerk gilt dabei den Fluktuationen der Grenzfläche, die in der Nähe des kritischen Punktes auf allen Größenskalen auftreten.



Es werden dreidimensionale Systeme in einem quaderförmigen Volumen  $L \times L \times D$  betrachtet, wobei gelegentlich der thermodynamische Limes  $L, D \rightarrow \infty$  durchgeführt wird. Die damit zweidimensionale Grenzfläche wird stets parallel zur  $x, y$ -Ebene, d. h. senkrecht zur  $z$ -Achse gelegt, vgl. nebenstehende Abbildung. Der Ordnungsparameter hängt damit nur noch von  $z$  ab.

In **Teil I** werden die in dieser Arbeit verwendeten Theorien zur Beschreibung von Grenzflächen vorgestellt. Nach einer kurzen Einführung in das Ising-Modell (Kapitel 1) wird zunächst die Landau-Theorie und ihre Erweiterung, die  $\phi^4$ -Theorie, diskutiert (Kapitel 2). Zur Berücksichtigung langwelliger Fluktuationen der Grenzfläche wird dann die Kapillarwellen-Theorie eingeführt (Kapitel 3), und schließlich werden beide Theorien in der Faltungsnäherung (Kapitel 4) kombiniert.

Die Dicke der Grenzfläche ist nicht eindeutig definiert. Deshalb werden in Kapitel 5 zunächst verschiedene Vorschläge für die Definition der Dicke untersucht, bevor zwei der Definitionen ausgewählt und zur numerischen Berechnung der Grenzflächendicke in der Faltungsnäherung verwendet werden.

In **Teil II** wird eine Monte-Carlo-Simulation des dreidimensionalen Ising-Modells präsentiert, das die in Teil I beschriebenen Theorien testen soll. In Abschnitt 6 werden die wesentlichen Aussagen der Theorien aus Teil I noch einmal zusammengefasst und Ziel und Methode der Simulation erläutert. Es sollen die Gültigkeitsbereiche der Theorien bestimmt und so zwei in den Theorien auftretende unbekannte Cutoffs abgeschätzt werden. Gleichzeitig wird dabei untersucht, ob das Konzept eines intrinsischen Mean-field-Profilen überhaupt sinnvoll ist und ob sich die Theorie durch Verwendung des  $\phi^4$ -1-Loop-Profilen anstelle des Landau-Profilen verbessern lässt. Dazu werden die Grenzflächen-Fluktuationen mittels eines Blocking-Verfahrens getrennt, das in Kapitel 7 ausführlich erläutert wird. Kapitel 8 präsentiert einige Details der Monte-Carlo-Simulation und der Auswertung, bevor in Kapitel 9 die Ergebnisse der Simulation in Hinblick auf die obigen Fragestellungen ausführlich diskutiert werden. Nach einem Vergleich eines Teils der Ergebnisse mit Monte-Carlo-Simulationen anderer Autoren in Kapitel 10 sowie einer kurzen Diskussion von Erweiterungen der Theorie aus Teil I in Kapitel 11 werden die Ergebnisse schließlich in Kapitel 12 zusammengefasst.



## **Teil I**

# **Theorie: Beschreibung von Grenzflächen**

# Kapitel 1

## Ising-Modell

Das Ising-Modell ist aufgrund seiner Einfachheit ein in der Grenzflächen-Physik häufig verwendetes Modell zur Untersuchung von Grenzflächen. Wegen der Universalität in der Nähe des kritischen Punktes sind die Ergebnisse gültig für alle Systeme in der Universalitätsklasse des Ising-Modells, d. h. mit gleicher Raumdimension und Symmetrie des Ordnungsparameters. Aus den beiden genannten Gründen wird auch in dieser Arbeit das Ising-Modell verwendet, das deshalb hier kurz vorgestellt wird.

Das **Ising-Modell** wurde ursprünglich entwickelt als ein einfaches Gitter-Modell für ein magnetisches System. Es wurde 1920 von Lenz vorgeschlagen und von seinem Studenten Ising für den eindimensionalem Fall gelöst. Die exakte Lösung des zweidimensionalen Ising-Modells im Jahr 1944 durch Onsager war ein wichtiger Schritt in der Geschichte der Statistischen Physik, da damit ein exakt lösbares System vorliegt, das einen Phasenübergang bei positiver Temperatur zeigt. Ein interessanter Überblick über die Geschichte des Ising-Modells findet sich in der Einleitung von [Vo03].

Auf mikroskopischer Ebene ist das Ising-Modell ein sehr seltsames Modell eines magnetischen Systems. Für das dreidimensionale Ising-Modell betrachtet man ein kubisches (Kristall-)Gitter der Größe  $L \times L \times D$  mit der Gitterkonstanten  $a$ . Auf jedem Gitterplatz  $i$  sitzt ein „klassischer Spin“  $S_i$ , der nur in zwei Richtungen (up/down) zeigen kann. Mathematisch bedeutet dies, dass  $S_i$  nur die Werte  $+1$  oder  $-1$  annehmen kann. Die Spins wechselwirken miteinander, jedoch wird nur die Wechselwirkung benachbarter Spins berücksichtigt.

Die **Hamilton-Funktion** des Ising-Modells ist

$$H = - \sum_{\langle ij \rangle} J_{ij} S_i S_j, \quad (1.1)$$

wobei  $\langle ij \rangle$  die nächsten Nachbarn auf dem Gitter bezeichnet.  $J_{ij}$  ist die Koppelung zwischen den zwei Spins  $S_i$  und  $S_j$ . Für einen Ferromagneten wird  $J_{ij} = 1$  für alle  $i, j$  gesetzt, d. h. parallel ausgerichtete Nachbarspins sind energetisch günstiger als antiparallel ausgerichtete. (Für einen Antiferromagneten würde man dementsprechend  $J_{ij} = -1$  setzen.)

Das Ising-Gitter wird zu einem Torus, indem man z. B. für die  $z$ -Richtung die oberste  $z$ -Ebene ( $z = D$ ) als untere Nachbar-Ebene für die unterste  $z$ -Ebene

---

( $z = 1$ ) betrachtet. Eine analoge Identifikation wird für die anderen zwei Gitter-Richtungen vorgenommen.

Das Ising-Modell zeigt für Dimensionen größer als 1 im thermodynamischen Limes einen **Phasenübergang** bei einer kritischen Temperatur  $T_c > 0$ . Oberhalb von  $T_c$  ist die mittlere Magnetisierung

$$M = \left\langle \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N S_i \right\rangle / M_{\text{ges}}$$

gleich Null, unterhalb von  $T_c$  bildet sich hingegen eine spontane Magnetisierung  $M = \pm M_s \neq 0$  aus. Dabei wurde die Magnetisierung auf die maximal mögliche Magnetisierung  $M_{\text{ges}}$  bei gleicher Ausrichtung aller Spins normiert, d. h.  $M_{\text{ges}}$  ist gleich dem Gittervolumen. Die spontane Magnetisierung ist also der Ordnungsparameter des Ising-Modells.

Für das dreidimensionale Ising-Modell liegt die inverse kritische Temperatur bei [HP92]

$$\beta_c = \frac{1}{k_B T_c} = 0.221652(3) \quad (1.2)$$

mit der Boltzmann-Konstanten  $k_B$ . Der Wert der spontanen Magnetisierung  $M_s$  lässt sich in der Nähe des kritischen Punktes approximieren durch [BT96]:

$$M_s(t) = (-t)^{0.32694109} \left\{ 1.6919045 - 0.42572366(-t) - 0.34357731(-t)^{0.50842062} \right\} \quad (1.3)$$

mit der **reduzierten Temperatur**

$$t = \frac{T - T_c}{T_c}.$$

Die Näherung ist gültig im Bereich  $t \in (-0.26, -0.0005)$ , also für die in dieser Arbeit untersuchten Temperaturen  $t \in [-0, 05, -0, 004]$  anwendbar.

Zur Untersuchung einer **Grenzfläche** eignet sich nur das Regime mit  $T < T_c$ , wo man Grenzflächen zwischen Domänen mit positiver Magnetisierung  $M = +M_s$  und Domänen mit negativer Magnetisierung  $M = -M_s$  erzeugen kann. Um Grenzflächen senkrecht zur z-Achse zu erhalten, werden in  $x$ - und  $y$ -Richtung periodische **Randbedingungen** und in  $z$ -Richtung antiperiodische Randbedingungen angelegt. Dies bedeutet, dass man alle Kopplungen  $J_{ij} = 1$  setzt außer die Kopplungen, die die oberste ( $z = D$ ) mit der untersten ( $z = 1$ )  $z$ -Ebene verbinden; diese setzt man  $J_{ij} = -1$ . Ein Beispiel einer Grenzfläche im Ising-Modell in der Nähe der kritischen Temperatur zeigt Abb. 1 in der Einleitung.

# Kapitel 2

## Mean-field-Theorie

### 2.1 Landau-Theorie

Gegenstand dieses Kapitels ist die Mean-field-Theorie, welche das Verhalten der Grenzfläche auf Größenskalen bis zu einigen Korrelationslängen beschreibt. Zunächst wird die Landau-Theorie diskutiert, die universell für Grenzflächen in der Nähe des kritischen Punktes gilt. Hieran anschließend wird über die mikroskopische „Herleitung“ der Landau-Theorie die  $\phi^4$ -Theorie motiviert. Deren Schleifenentwicklung stimmt in nullter Ordnung mit der Landau-Theorie überein; die erste Ordnung liefert Korrekturen.

#### 2.1.1 Landau-Freie Energiedichte und kritische Phänomene

In dieser Arbeit wird das Verhalten von Grenzflächen in der Nähe des kritischen Punktes betrachtet. Wie in der Einleitung beschrieben, kann in der Umgebung des kritischen Punktes das System durch den Ordnungsparameter  $\phi$  charakterisiert werden. Aus Postulaten über Analytizität und Symmetrie (s. z. B. [Go92]) erhält man für den Ordnungsparameter die universelle Landau-Freie Energiedichte

$$\mathcal{L}(\phi(x)) = \frac{1}{2}(\partial\phi(x))^2 + V(\phi(x)) \quad (2.1)$$

mit dem  $\phi^4$ -Potenzial

$$V(\phi) = \frac{g}{4!}\phi^4 + \frac{m^2}{2}\phi^2 + C. \quad (2.2)$$

Das Minimum dieser Freien Energiedichte bestimmt den Verlauf des Ordnungsparameters im thermodynamischen Gleichgewicht. Die Energiedichte ist invariant unter der Symmetrie-Transformation

$$\phi \rightarrow -\phi. \quad (2.3)$$

Die „Kopplungskonstante“  $g$ , das „Massenquadrat“  $m^2$  und die „Normierungskonstante“  $C$  sind temperaturabhängige Parameter. Dabei muss  $g > 0$  sein, damit das Potenzial nach unten beschränkt ist und ein globales Minimum

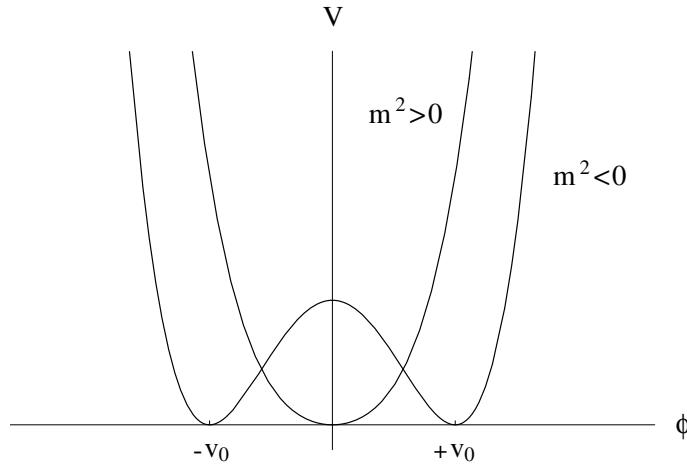


Abb. 2.1: Das  $\phi^4$ -Potenzial (2.2) für  $m^2 > 0$  und  $m^2 < 0$ .

besitzt. Die Konstante  $C$  dient dazu, das Potenzial so zu normieren, dass für das Minimum  $v_0$  des Potenzials

$$V(v_0) = 0 \quad (2.4)$$

gilt. Der Parameter  $m^2$  steuert den Phasenübergang: Eine Veränderung des Vorzeichens von  $m^2$  bewirkt eine qualitative Veränderung des Systemverhaltens (vgl. Abb. 2.1):

- **Symmetrische Phase**

Im Fall  $m^2 > 0$  ist das Potenzial  $V$  konkav und hat ein eindeutiges Minimum bei  $\phi \equiv 0$ . Das System liegt also nur in einer Phase vor (charakterisiert durch  $\phi \equiv 0$ ), die die Symmetrie (2.3) respektiert. Das auf  $V(0) = 0$  normierte Potenzial ist:

$$V(\phi) = \frac{g}{4!} \phi^4 + \frac{m^2}{2} \phi^2 \quad (2.5)$$

- **Phase gebrochener Symmetrie**

Im Fall  $m^2 < 0$  ist  $V$  ein (nicht mehr konkav) Doppelmulden-Potenzial mit den zwei Minima  $\pm\sqrt{-6m^2/g}$ . Um das Massenquadrat positiv zu halten, wird in dieser Phase  $-2m^2 \rightarrow m^2$  gesetzt, so dass die Potenzial-Minima bei  $\phi \equiv \pm v_0$  mit den Werten

$$v_0 = \sqrt{\frac{3m^2}{g}} \quad (2.6)$$

liegen. Das auf  $V(\pm v_0) = 0$  normierte Potenzial lautet nun

$$V(\phi) = \frac{g}{4!} (\phi^2 - v_0^2)^2 = \frac{g}{4!} \phi^4 - \frac{m^2}{4} \phi^2 + \frac{3}{8} \frac{m^4}{g}. \quad (2.7)$$

Die Gesamtheit der Minima  $\{-v_0, +v_0\}$  respektiert die Symmetrie (2.3), jedes einzelne Minimum aber nicht. Es liegt also spontane Symmetriebrechung vor, die dem System die Möglichkeit gibt, in zwei Phasen vorzuliegen.

Das Vorzeichen des Parameters  $m^2$  aus (2.2) legt somit fest, ob das System zwei Phasen ausbilden kann oder nicht. Man wird demnach für  $m^2$  einen Nulldurchgang bei der kritischen Temperatur  $T_c$  ansetzen:

$$m^2 \sim (T - T_c)$$

Der Parameter  $m$  ist gerade die inverse Korrelationslänge  $\xi$  der homogenen Phase (s. z. B. [Go92]):

$$m = \frac{1}{\xi}, \quad (2.8)$$

so dass die Korrelationslänge am kritischen Punkt divergiert:

$$\xi \sim (T - T_c)^{-\frac{1}{2}}.$$

Dieses Divergenz-Verhalten ist typisch in der Nähe des kritischen Punktes, wo Systemgrößen universelles Skalenverhalten in der folgenden Form zeigen:

$$\begin{aligned} \text{Korrelationslänge: } \xi &= f(-t)^{-\nu} \\ \text{Oberflächenspannung: } \sigma &= \sigma_0 (-t)^{2\nu} \end{aligned} \quad (2.9)$$

Dabei sind die **kritischen Exponenten** ( $\nu$  und  $\mu = 2\nu$ ) universell, während die kritischen Amplituden ( $f$  und  $\sigma_0$ ) vom speziellen System abhängen. In der Landau-Mean-field-Theorie errechnet sich der kritische Exponent  $\nu$  zu  $\nu = \frac{1}{2}$ . Dies ist in drei Raum-Dimensionen jedoch falsch, der numerisch bestimmte Wert ist [GZ98]

$$\nu = 0,6304(13). \quad (2.10)$$

Im dreidimensionalen Ising-Modell sind die kritischen Amplituden:

$$\begin{aligned} f &= 0.2502(8) && (\text{nach [LF89]}) \\ \sigma_0 &= 1.55(5) && (\text{nach [HP97]}) \end{aligned} \quad (2.11)$$

### 2.1.2 Modellierung der Grenzfläche durch Randbedingungen

Die Landau-Energiedichte (2.1) und die zugehörige **Landau-Energie**

$$S[\phi] = \int d^3x \mathcal{L}(\phi(x)) = \int d^3x \left( \frac{1}{2}(\partial\phi)^2 + V(\phi) \right)$$

(2.12)

beschreiben das System in der Nähe des kritischen Punktes. Der Ordnungsparameter  $\phi = \phi_g$  im thermodynamischen Gleichgewicht minimiert die Landau-Energie:

$$\frac{\delta S[\phi_g]}{\delta \phi_g} = -\partial^2 \phi_g + V'(\phi_g) = -\partial^2 \phi_g + \frac{g}{3!} \phi_g^3 - \frac{m^2}{2} \phi_g = 0 \quad (2.13)$$

Offensichtlich kann man nur in der Phase gebrochener Symmetrie mit dem Potenzial (2.7) zwei Phasen und damit eine Grenzfläche im System erhalten, wobei die zwei Phasen den zwei Potenzial-Minima bei  $\phi = \pm v_0 = \pm\sqrt{3m^2/g}$  entsprechen. Die genaue Verteilung der zwei Phasen im System hängt von Anfangs- und Randbedingungen ab. In der hier vorliegenden  $L \times L \times D$ -Geometrie legt man die Grenzfläche senkrecht zur  $z$ -Richtung, indem gefordert wird, dass der Ordnungsparameter nur von  $z$  abhängt:

$$\phi_g(x, y, z) = \phi_g(z)$$

Dann kann das Auftreten einer Grenzfläche durch Randbedingungen in  $z$ -Richtung gesteuert werden. Um einfache Ausdrücke für die Lösung der Bewegungsgleichung (2.13) zu erhalten, wird im thermodynamischen Limes  $D \rightarrow \infty$  gearbeitet, während zur Berechnung der Grenzflächen-Energie eine endliche Systembreite  $L < \infty$  beibehalten wird.

Gibt man **periodische Randbedingungen**

$$\phi_g(z \rightarrow \pm \frac{D}{2}) = \pm \infty = v_0 \quad (2.14)$$

vor, so bildet das System eine gerade Anzahl von Grenzflächen aus. Die Lösung der Bewegungsgleichung (2.13) mit der niedrigsten Energie unter diesen Randbedingungen ist das konstante Feld

$$\phi_g(z) = v_0.$$

Dies entspricht dem Vorliegen keiner Grenzfläche, also nur einer homogenen Phase. Die Konfigurationen mit Grenzflächen sind ebenfalls Lösungen von (2.13) unter den Randbedingungen (2.14), sind aber aufgrund ihrer höheren Energie im thermodynamischen Gleichgewicht exponentiell unterdrückt. Das Feld  $v_0$  hat (mit der Potenzialnormierung (2.4)) die Energie

$$S[v_0] = 0. \quad (2.15)$$

Gibt man hingegen **antiperiodische Randbedingungen**

$$\phi_g(z \rightarrow \pm \frac{D}{2}) = \pm v_0 \quad (2.16)$$

vor, so bildet das System eine ungerade Anzahl an Grenzflächen aus. Der Fall mit genau einer Grenzfläche hat die niedrigste Energie und entspricht dem **Kink-Profil**

$$\phi_g(z) = v_0 \tanh\left(\frac{m}{2}(z - h)\right) =: \phi_K(z) \quad (2.17)$$

mit beliebiger Konstanten  $h$ , die den Nulldurchgang des Kinks angibt. Der Verlauf des Ordnungsparameters mit der niedrigsten Landau-Energie entspricht also einer bei  $h$  gelegenen Grenzfläche zwischen der Phase  $-v_0$  bei  $z = -\infty$  und der Phase  $+v_0$  bei  $z = +\infty$  mit Dicke  $w$ :

$$w \sim \frac{1}{m} = \xi$$

Die Energie der Grenzfläche ist

$$S[\phi_K] = \frac{2m}{3}v_0^2 L^2 = \frac{2}{3\sqrt{3}}\sqrt{g}v_0^3 L^2 = \frac{2m^3}{g} L^2 \quad (2.18)$$

und damit größer als die des Zustands ohne Grenzfläche,  $S[v_0] = 0$ . Diese Energie-Differenz entspricht der zur Bildung der Grenzfläche benötigten Energie.

## 2.2 $\phi^4$ -Theorie

### 2.2.1 Mikroskopische Landau-Theorie und $\phi^4$ -Theorie

In diesem Abschnitt wird die  $\phi^4$ -Theorie als eine Erweiterung der Landau-Theorie motiviert, die durch Grobkörnung aus einem mikroskopischen Modell entsteht. Gleichzeitig wird dabei der Gültigkeitsbereich der Landau-Theorie abgeschätzt.

Als Beispiel für ein mikroskopisches Modell dient das in Kapitel 1 vorgestellte Ising-Modell. Ordnungsparameter des Ising-Modells ist der statistische Mittelwert des Spins, die spontane Magnetisierung  $M_s \sim \langle S_i \rangle$ . Die Landau-Theorie beschreibt das Verhalten dieses Ordnungsparameters, jedoch nicht auf mikroskopischer Skala, sondern erst nach einer **Grobkörnung**

$$\phi(x) = \frac{1}{N_B} \sum_{i \in B(x)} \langle S_i \rangle \quad (2.19)$$

über einen um den Punkt  $x$  zentrierten Block  $B(x)$  der Länge  $B$ , der  $N_B$  Spins enthält. Dabei sollte die Größe  $B$  dieses Blocks zwischen der mikroskopischen Länge  $a$  (Gitterkonstante) und der Korrelationslänge  $\xi$  liegen:

$$a < B < \xi$$

Dadurch wird erreicht, dass die hier unerheblichen mikroskopischen Details „weggemittelt“, die am kritischen Punkt wichtigen langwelligeren Fluktuationen jedoch berücksichtigt werden. Der Ordnungsparameter  $\phi(x)$  der Landau-Theorie ist somit eine fast kontinuierliche und räumlich langsam variierende Funktion, die das System auf der Größenskala  $B$  beschreibt.

Die exakte Freie Energie  $W$  des Ising-Systems ist gegeben durch

$$e^{-\beta W} = Z = \sum_{\{S_i\}} e^{-\beta H(\{S_i\})},$$

wobei in der Zustandssumme  $Z$  über alle Spin-Konfigurationen  $\{S_i\}$  summiert wird. Die Energie  $S[\phi]$  der Konfiguration  $\phi(x)$  erhält man durch Einschränkung der Summation auf alle mikroskopischen Spin-Konfigurationen, die mit der grobgekörnten Konfiguration verträglich sind:

$$e^{-\beta S[\phi]} = \sum_{\{S_i\}} e^{-\beta H(\{S_i\})} \delta\left(\frac{1}{N_B} \sum_{i \in B(x)} \langle S_i \rangle - \phi(x)\right)$$

Die Freie Energie  $S[\phi]$  ist nach der Diskussion im letzten Kapitel gerade die Landau-Freie-Energie (2.12):

$$S[\phi] = \int d^3x \left( \frac{1}{2}(\partial\phi)^2 + \frac{g}{4!}\phi^4 - \frac{m^2}{2}\phi^2 + \frac{3}{8}\frac{m^4}{g} \right)$$

Eigentlich enthält die grobgekörnte Freie Energie  $S[\phi]$  noch höhere Potenzen in  $\phi$ ; diese spielen aber in der Nähe des kritischen Punktes keine Rolle.

Bezeichnet  $\{\bar{S}\}$  alle Spin-Konfigurationen, die  $\phi(x)$  ergeben, und  $\{S^*\}$  alle übrigen Konfigurationen, so ist

$$e^{-\beta S[\phi]} = \sum_{\{\bar{S}\}} e^{-\beta H(\{S_i\})}$$

und

$$e^{-\beta W} = \sum_{\{S^*\}} \sum_{\{\bar{S}\}} e^{-\beta H(\{S_i\})} = \sum_{\{S^*\}} e^{-\beta S[\phi]}.$$

Die Summation  $\sum_{\{S^*\}}$  ist eine Summation über alle möglichen grobgekörnten Funktionen  $\phi(x)$ . Sie kann durch ein Pfadintegral approximiert werden:

$$e^{-\beta W} = \int \mathcal{D}\phi e^{-\beta S[\phi]}, \quad (2.20)$$

wobei nun allerdings über alle Konfigurationen  $\phi$  integriert wird und nicht nur über die grobgekörnten Konfigurationen nach (2.19).

### 2.2.2 Äquivalenz zur Quantenfeldtheorie

Dieses Pfadintegral (2.20) ist gerade das Erzeugende Funktional einer euklidischen Quantenfeldtheorie, falls man identifiziert:

Ordnungsparameter $\phi(x)$ , $x \in \mathbb{R}^3$	$\rightarrow$	Feld $\phi(x)$ , $x \in \mathbb{R}^3$
Temperatur $k_B T = 1/\beta$	$\rightarrow$	Plancksche Konstante $\hbar$
Energiedichte $\mathcal{L}(\phi)$	$\rightarrow$	Lagrange-Dichte $\mathcal{L}(\phi)$
Hamiltonfunktion	$\rightarrow$	euklidische Wirkung
$S[\phi] = \int d^3x \mathcal{L}(\phi(x))$		$S[\phi] = \int d^3x \mathcal{L}(\phi(x))$

Das Erzeugende Funktional der zugehörigen Quantenfeldtheorie

$$Z = \int \mathcal{D}\phi e^{-\frac{1}{\hbar}S[\phi]}$$

(2.21)

mit der Wirkung

$$S[\phi] = \int d^3x \mathcal{L}(\phi(x)) = \int d^3x \left( \frac{1}{2}(\partial\phi(x))^2 + V(\phi(x)) \right) \quad (2.22)$$

und dem Potenzial

$$V(\phi) = \frac{g}{4!}\phi^4 - \frac{m^2}{2}\phi^2 + \frac{3}{8}\frac{m^4}{g}, \quad (2.23)$$

führt also auf die quantenfeldtheoretische  $\phi^4$ -Theorie eines reellen Skalarfeldes mit Selbstwechselwirkung.

Die  $\phi^4$ -Theorie enthält somit die Landau-Theorie, geht aber über sie hinaus, da sie auch Fluktuationen des Ordnungsparameters  $\phi$  um den Landau-Ordnungsparameter  $\phi_g(z)$  berücksichtigt.

Eine Beschreibung der feldtheoretischen Behandlung von Grenzflächen findet sich in [MGL95], [Mu97].

### 2.2.3 Erzeugende Funktionale

Aus praktischen Gründen führt man ein äußeres Feld  $J$  und das **Erzeugende Funktional**

$$Z[J] = \int \mathcal{D}\phi e^{-\frac{1}{\hbar}S[\phi]} e^{\frac{1}{\hbar} \int d^3x J(x)\phi(x)} = \int \mathcal{D}\phi e^{-\frac{1}{\hbar}S[\phi, J]} \quad (2.24)$$

ein mit der von  $J$  abhängigen Wirkung

$$\begin{aligned} S[\phi, J] &= S[\phi] - \int d^3x J(x)\phi(x) \\ &= \int d^3x \left( \frac{1}{2}(\partial\phi(x))^2 + V(\phi(x)) - J(x)\phi(x) \right). \end{aligned}$$

Aus  $Z[J]$  erhält man die „alte“ thermodynamische Zustandssumme durch Nullsetzen der Quelle:  $Z = Z[J = 0]$ .

Ein praktischer Nutzen der Einführung der Quelle  $J$  besteht darin, dass  $Z[J]$  das erzeugende Funktional der Korrelations- bzw. Green-Funktionen ist. Beispielsweise ergibt sich für den Erwartungswert des Feldes

$$\langle\phi(x)\rangle = \frac{\int \mathcal{D}\phi \phi(x)e^{-\frac{1}{\hbar}S[\phi]}}{\int \mathcal{D}\phi e^{-\frac{1}{\hbar}S[\phi]}} = \frac{\hbar}{Z} \frac{\delta}{\delta J(x)} Z[J] \Big|_{J=0}.$$

Arbeitet man in einer Theorie mit äußerem Feld, d. h. mit einem System, das durch  $S[\phi, J]$  beschrieben wird, so entfällt  $J = 0$ :

$$\langle\phi(x)\rangle_J = \frac{\int \mathcal{D}\phi \phi(x)e^{-\frac{1}{\hbar}S[\phi, J]}}{\int \mathcal{D}\phi e^{-\frac{1}{\hbar}S[\phi, J]}} = \frac{\hbar}{Z} \frac{\delta}{\delta J(x)} Z[J]$$

Die **Freie Energie**  $W$  ist der Logarithmus der Zustandssumme:

$$W[J] = -\hbar \ln Z[J] \quad (2.25)$$

$W[J]$  ist das Erzeugende Funktional der verbundenen Green-Funktionen bzw. der Kumulantens. Die erste Kumulante stimmt mit dem ersten Moment überein:

$$\begin{aligned} \langle\phi(x)\rangle_{c,J} &= -\frac{\delta W[J]}{\delta J(x)} = \langle\phi(x)\rangle_J \\ \langle\phi(x)\rangle_c &= -\frac{\delta W[J]}{\delta J(x)} \Big|_{J=0} = \langle\phi(x)\rangle \end{aligned}$$

Der mittlere Wert des Ordnungsparameters bei äußerem Feld  $J$  bzw. der entsprechende Vakuumerwartungswert des Feldoperators wird auch als **klassisches Feld**  $\phi_c$  bezeichnet:

$$\phi_c(x) := \langle \phi(x) \rangle_J = \langle 0_J | \phi(x) | 0_J \rangle = -\frac{\delta W[J]}{\delta J(x)} \quad (2.26)$$

Nach dieser Definition ist  $\phi_c$  ein Funktional der Quelle  $J$ . Andersherum kann man über (2.26) aber auch  $J$  als Funktional von  $\phi_c$  auffassen.

Eine Legendre-Transformation ergibt das Erzeugende Funktional der eigentlichen Vertexfunktionen bzw. die **Effektive Wirkung**:

$$\Gamma[\phi_c] = W[J] + \int d^3x J(x) \phi_c(x) \quad (2.27)$$

mit dem in (2.26) definierten klassischen Feld  $\phi_c$ . Das Vorzeichen des Terms  $\int d^3x J(x) \phi_c(x)$  in der Legendre Transformation ist dabei entgegengesetzt zu dem Vorzeichen des entsprechenden Terms in der Wirkung  $S[\phi, J] = S[\phi] - \int d^3x J(x) \phi(x)$  zu wählen.

Die Effektive Wirkung  $\Gamma$  ist nur von  $\phi_c$  abhängig ( $\frac{\delta \Gamma}{\delta J} = 0$ ), was es für die Statistische Mechanik interessant macht, da  $\phi_c$  ja gerade den Verlauf des gemittelten Ordnungsparameters bei äußerem Feld angibt. Wegen

$$\frac{\delta \Gamma[\phi_c]}{\delta \phi_c(x)} = J(x) \quad (2.28)$$

erhält man den Erwartungswert des Feldes ohne Quelle  $J$  als stationären Punkt von  $\Gamma$ :

$$\frac{\delta \Gamma[\phi_c]}{\delta \phi_c(x)} = 0 \quad \text{für } J = 0, \text{ d. h. } \phi_c(x) = \langle \phi \rangle_{J=0}$$

(2.29)

Dies stellt eine Bewegungsgleichung für den Felderwartungswert  $\phi_c(x) = \langle \phi(x) \rangle$  analog zur klassischen Bewegungsgleichung dar, die die stationären Punkte der klassischen Wirkung  $S$  sucht.

Folgende Tabelle gibt eine Übersicht über die Interpretation der verschiedenen Größen in Statistischer Physik und Quantenfeldtheorie:

Größe	Statistische Physik	Quantenfeldtheorie
$\phi(x)$	Ordnungsparameter	Feld, Integrationsvariable im Pfadintegral
$\langle \phi(x) \rangle$	Mittlerer Ordnungsparameter	Vakuumerwartungswert des Feldes
$\phi_c(x)$	Mittlerer Ordnungsparameter bei äußerem Feld	Klassisches Feld, Vakuumerwartungswert des Feldoperators bei äußerem Feld
$Z$	Kanonische Zustandssumme	Normierung des Erzeugenden Funktionals
$Z[J]$	Zustandssumme mit äußerem Feld, erzeugt die Momente	Erzeugendes Funktional der Green-Funktionen
$W[J=0]$	Freie Energie	
$W[J]$	Freie Energie mit äußerem Feld, erzeugt die Kumulantenn	Erzeugendes Funktional der verbundenen Green-Funktionen
$\Gamma[\phi_c]$	Thermodynamisches Potenzial bei Vorgabe von Energie und Ordnungsparameter	Effektive Wirkung, Erzeugendes Funktional der 1-Teilchen-irreduziblen Vertex-Funktionen

## 2.3 Intrinsisches Profil der $\phi^4$ -Theorie

### 2.3.1 Schleifenentwicklung

Die im letzten Abschnitt vorgestellten Erzeugenden Funktionale der  $\phi^4$ -Theorie können nicht analytisch berechnet werden. Deshalb wird eine **Schleifen- oder Loop-Entwicklung** durchgeführt, d. h. eine Sattelpunktsentwicklung nach dem Parameter  $\hbar$  um das durch

$$\left. \frac{\delta S[\phi]}{\delta \phi} \right|_{\phi=\phi_0^0} = 0 \quad (2.30)$$

bestimmte Minimum der Wirkung  $S$  bei  $\phi_0^0$ . In erster Ordnung in  $\hbar$  liefert die Schleifenentwicklung für die Effektive Wirkung (siehe z. B. [Am78] oder [Ku01]):

$$\begin{aligned} \Gamma[\phi_c] &= \int d^3x \left( \frac{1}{2}(\partial\phi_c(x))^2 + V(\phi_c(x)) \right) \\ &\quad + \hbar \frac{1}{2} \ln \det(-\partial^2 + V''(\phi_c)) + \mathcal{O}(\hbar^2) \end{aligned} \quad (2.31)$$

Die Minimierungsbedingung (2.30) ist dieselbe Gleichung wie die Minimierung (2.13) der Landau-Freien Energie, so dass der Entwicklungspunkt der Schleifenentwicklung gerade der Ordnungsparameter der Landau-Theorie ist. Damit erhält man die Sattelpunkte

$$\begin{aligned} \phi_0^0(z) &= v_0 && \text{für periodische Randbedingungen,} \\ \phi_0^0(z) &= v_0 \tanh\left(\frac{m}{2}(z - h)\right) && \text{für antiperiodische Randbedingungen} \end{aligned}$$

mit den entsprechenden Wirkungen

$$\begin{aligned} S[\phi_0^0(z)] &= 0 && \text{für periodische Randbedingungen,} \\ S[\phi_0^0(z)] &= \frac{2m^3L^2}{g} && \text{für antiperiodische Randbedingungen.} \end{aligned}$$

Anders als in der Landau-Theorie ist der Gleichgewichts-Ordnungsparameter der  $\phi^4$ -Theorie aber nicht das Minimum  $\phi_0^0$  der Wirkung  $S$ , sondern das mittlere Feld  $\langle \phi(z) \rangle$ , das nach (2.29) bestimmt ist durch die Bewegungsgleichung

$$\left. \frac{\delta \Gamma[\phi_c]}{\delta \phi_c(z)} \right|_{\phi_c(z)=\langle \phi(z) \rangle} = 0. \quad (2.32)$$

Die für das Feld  $\phi$  vorgegebenen Randbedingungen übertragen sich wegen

$$\langle \phi(z) \rangle = \int \mathcal{D}\phi \phi(z) e^{-\frac{1}{\hbar}S[\phi]}$$

unmittelbar auf den mittleren Ordnungsparameter  $\langle \phi(z) \rangle$ ; wie in der Landau-Theorie kann über die Vorgabe von Randbedingungen in  $z$ -Richtung zur Bewegungsgleichung (2.32) das Auftreten der Grenzfläche gesteuert werden.

### 2.3.2 Intrinsisches Profil in nullter Ordnung: Landau-Theorie

In nullter Ordnung ist die Effektive Wirkung nach (2.31)

$$\Gamma[\phi_c] = S[\phi_c] = \int d^3x \left( \frac{1}{2}(\partial\phi_c)^2 + V(\phi_c) \right),$$

und man erhält mit (2.32) die Landau-Theorie, deren Ergebnisse somit übernommen werden können. Im Falle periodischer Randbedingungen ist der mittlere Ordnungsparameter konstant:

$$\langle \phi(z) \rangle = v_0$$

und es liegt eine homogene Phase vor. Im Falle antiperiodischer Randbedingungen erhält man den Kink

$$\langle \phi(z) \rangle = v_0 \tanh \left( \frac{m}{2}(z - h) \right) = \phi_K(z),$$

der eine Grenzfläche beschreibt.

Die zu diesen Randbedingungen gehörenden Zustandssummen  $Z_{++}$  (periodische Randbedingungen) bzw.  $Z_{+-}$  (antiperiodische Randbedingungen) beschreiben in der Quantenfeldtheorie Vakuum-Vakuum-Übergangsamplituden. Die Interpretation derselben hängen davon ab, ob bei Rotation in den Minkowski-Raum die  $z$ -Richtung mit der Zeit- oder mit einer der Raumrichtungen identifiziert wird. In ersterem Fall hat man bei antiperiodischen Randbedingungen einen „Zeitkink“, der den Übergang vom Vakuum  $|0_-\rangle$  mit dem Erwartungswert  $\langle 0_- | \phi(z) | 0_- \rangle = -v_0$  zum Vakuum  $|0_+\rangle$  mit dem Erwartungswert  $\langle 0_+ | \phi(z) | 0_+ \rangle = +v_0$  in der Zeit D beschreibt:

$$Z_{+-} = \langle 0_+, \frac{D}{2} | -\frac{D}{2}, 0_- \rangle = \langle 0_+ | e^{-\frac{1}{\hbar} DH} | 0_- \rangle.$$

Dabei ist H der zur Wirkung  $S$  gehörende Hamilton-Operator. Im zweiten Fall des „Raumkinks“ hat man den Übergang vom „Kink-Zustand“  $|0_K\rangle$  zu sich selbst in der Zeit L

$$Z_{+-} = \langle 0_K, \frac{L}{2} | -\frac{L}{2}, 0_K \rangle = \langle 0_K | e^{-\frac{1}{\hbar} LH} | 0_K \rangle.$$

Der Erwartungswert des Kink-Zustands

$$\langle 0_K | \phi(z) | 0_K \rangle = v_0 \tanh \left( \frac{m}{2}(z - h) \right)$$

ist im Gegensatz zum Erwartungswert des „normalen“ Vakuums  $|0_+\rangle$  keine Konstante mehr, bricht also die Lorentz-Invarianz. Dies kann als das Vorliegen eines Teilchens am Ort h interpretiert werden. Der Kink-Zustand  $|0_K\rangle$  hat eine höhere Energie als das Vakuum  $|0_+\rangle$ , ist aber aufgrund der antiperiodischen Randbedingungen stabil (Erhaltung der topologischen Ladung).

### 2.3.3 Intrinsisches Profil in erster Ordnung nach Küster

#### Gradienten-Entwicklung

In 1-Loop-Ordnung wird die Grenzfläche bestimmt durch die Bewegungsgleichung (2.32) mit der 1-Loop-Effektiven Wirkung (2.31); alle Terme der Ordnung  $\mathcal{O}(\hbar^2)$  werden vernachlässigt. Zusätzlich zu dieser Näherung wird angenommen, dass der Ordnungsparameter  $\phi_c$  nur langsam variiert, so dass man eine **Gradienten-Entwicklung** der Effektiven Wirkung durchführen kann:

$$\Gamma[\phi_c] = \int d^3x \left( V_{\text{eff}}(\phi_c(x)) + \frac{1}{2} \mathcal{Z}(\phi_c(x)) (\partial\phi_c(x))^2 + \dots \right) \quad (2.33)$$

Dabei ist  $V_{\text{eff}}$  das so genannte Effektive Potenzial (in Analogie zu dem in der klassischen Wirkung  $S$  auftretenden Potenzial  $V$ ) und  $\mathcal{Z}$  der Vorfaktor des kinetischen Terms. Diese **lokale Potenzialapproximation** (2.33) bewirkt, dass sich das in dieser Näherung berechnete Profil wie ein Mean-field-Profil verhält.

Nach Küster ([Ku01]) ergibt sich in drei Dimensionen in 1-Loop-Ordnung für das effektive Potenzial

$$V_{\text{eff}}(\phi_c) = V(\phi_c) + \hbar \frac{1}{12} \left\{ m^3 - \left( -\frac{1}{2}m^2 + \frac{g}{2}\phi_c^2 \right)^{\frac{3}{2}} \right\}$$

und für den kinetischen Term:

$$\mathcal{Z}(\phi_c) = 1 + \hbar \frac{g^2}{192\pi} \phi_c^2 \left( -\frac{1}{2}m^2 + \frac{g}{2}\phi_c^2 \right)^{-\frac{3}{2}}.$$

Damit erhält man für die Feldrenormierungskonstante  $Z_3 = \frac{1}{\mathcal{Z}}$  in  $\mathcal{O}(\hbar)$ :

$$Z_3(\phi_c) = 1 - \hbar \frac{g^2}{192\pi} \phi_c^2 \left( -\frac{1}{2}m^2 + \frac{g}{2}\phi_c^2 \right)^{-\frac{3}{2}}$$

Als weitere Approximation wird die räumliche Variation des Vorfaktors  $\mathcal{Z}(\phi_c)$  vernachlässigt und nur die stationäre Feldrenormierungskonstante verwendet:

$$Z_3(\phi_c = v_0) = 1 - \hbar \frac{1}{8} \frac{g}{8\pi m}$$

Der Verlauf des Ordnungsparameters folgt nun aus der Minimierung der Effektiven Wirkung (2.33):

$$\frac{\delta \Gamma[\phi_c]}{\delta \phi_c} = -\frac{1}{Z_3} \partial^2 \phi_c + V'_{\text{eff}}(\phi_c) = 0 \quad (2.34)$$

Mit den für die Existenz einer Grenzfläche notwendigen antiperiodischen Randbedingungen, dass das Profil im Unendlichen gegen das negative bzw. positive Minimum des effektiven Potenzials gehen soll, ergibt eine Integration von (2.34) folgende Differentialgleichung:

$$\partial\phi_c = \sqrt{2Z_3 V_{\text{eff}}(\phi_c)} \quad (2.35)$$

Zu ihrer Lösung führt man die dimensionslose Feldvariable

$$\chi_g(z) = \frac{\phi_c(z)}{v_0} \quad (2.36)$$

und die dimensionslose Kopplung

$$u_0 = \frac{g}{m} \quad (2.37)$$

ein und löst dann (2.35) mit Hilfe des störungstheoretischen Ansatzes

$$\chi_g(z) = \chi_g^{(0)}(z) + \frac{u_0}{8\pi} \chi_g^{(1)}(z) + \mathcal{O}(u_0^2). \quad (2.38)$$

Das Grenzflächenprofil muss durch

### Renormierte Größen

ausgedrückt werden, die mit dem Index „R“ gekennzeichnet werden:

renormiertes Feld:	$\phi_R(x) = \frac{1}{\sqrt{Z_3(u_0)}} \phi_c(x)$
renormierte Masse:	$m_R^2 = -Z_3(u_0) \Gamma_0^{(2)}(0; m, g)$
renormierte Kopplung:	$g_R = \frac{3m_R^2}{v_R^2}$
renormierter Vakuumerwartungswert:	$v_R = Z_3^{-\frac{1}{2}} v$

Dabei ist die statische Feldrenormierungskonstante

$$Z_3^{-1}(u_0) = -\left. \frac{\partial \Gamma_0^{(2)}(p; m, g)}{\partial p^2} \right|_{p^2=0}$$

das Inverse des kinetischen Terms  $\mathcal{Z}. v$  bezeichnet den nicht-renormierten Vakuumerwartungswert des Feldes und  $\Gamma_0^{(2)}$  die zweite 1-Teilchen-irreduzible Vertexfunktion. Küster führt eine Renormierung durch Subtraktion bei verschwindendem Impuls mit folgenden Renormierungsbedingungen:

$$\begin{aligned} \Gamma_R^{(2)}(0; m_R, u_R) &= -m_R^2 \\ \left. \frac{\partial}{\partial p^2} \Gamma_R^{(2)}(p; m_R, u_R) \right|_{p^2=0} &= -1 \\ \frac{3}{v_R^2} \Gamma_R^{(2)}(0; m_R, u_R) &= -g_R \\ \frac{\partial}{\partial m_R^2} \Gamma_R^{(2)}(0; m_R, u_R) &= -1 \end{aligned}$$

### Renormiertes Grenzflächenprofil

Damit erhält Küster das renormierte Grenzflächenprofil:

$$\phi_{gR}(z) = \sqrt{\frac{3m_R}{u_R}} \chi_{gR}(z) = \sqrt{\frac{3m_R}{u_R}} \left\{ \chi_{gR}^{(0)}(t_R) + \frac{u_R}{8\pi} \chi_{gR}^{(1)}(t_R) + \mathcal{O}(u_R^2) \right\} \quad (2.39)$$

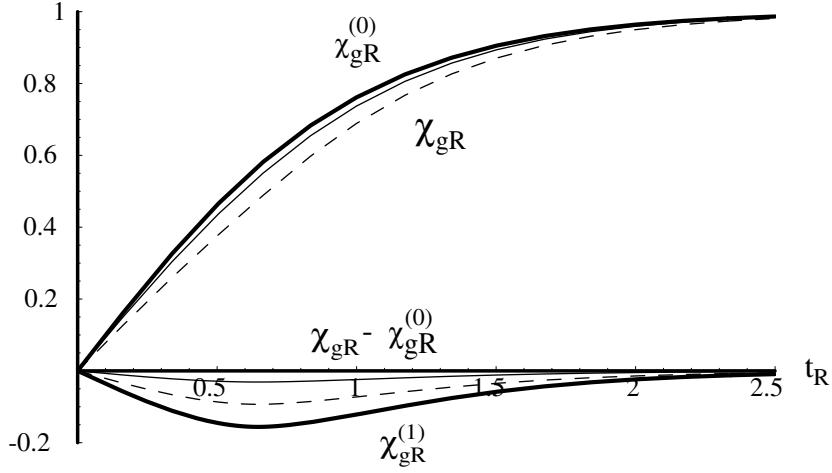


Abb. 2.2: Treelevel-Funktion  $\chi_{gR}^{(0)}$  und 1-Loop-Funktion  $\chi_{gR}^{(1)}$  (dick) sowie Gesamtprofil  $\chi_{gR}$  und 1-Loop-Beitrag  $\chi_{gR} - \chi_{gR}^{(0)}$  für  $u_R = 5$  (dünn) und  $u_R = 15$  (gestrichelt).

Dabei enthält das renormierte Argument

$$t_R = \frac{m_R}{2}(z - h) \quad (2.40)$$

den beliebigen reellen Parameter  $h$ , der den Ort der Grenzfläche (d. h. den Nulldurchgang der Grenzflächenprofils) angibt.

Für das Treelevel-Profil ergibt sich der bekannte tanh-Kink der Landau-Theorie:

$$\chi_{gR}^{(0)}(t_R) = \tanh t_R$$

Das 1-Loop-Profil ist

$$\chi_{gR}^{(1)}(t_R) = \begin{cases} \chi_{gR<}^{(1)}(t_R) & \text{für } |t_R| \leq t_g \\ \chi_{gR>}^{(1)}(t_R) & \text{für } |t_R| \geq t_g. \end{cases}$$

mit

$$t_g = \operatorname{arsinh} \frac{1}{\sqrt{2}} = \operatorname{artanh} \frac{1}{\sqrt{3}}$$

und

$$\begin{aligned} \chi_{gR<}^{(1)}(t_R) &= \frac{1}{12} t_R \operatorname{sech}^2 t_R + \frac{2}{9} \sinh t_R \cosh t_R - \frac{2}{3} \tanh t_R \\ \chi_{gR>}^{(1)}(t_R) &= \frac{1}{12} t_R \operatorname{sech}^2 t_R + \frac{2}{9} \sinh t_R \cosh t_R - \frac{2}{3} \tanh t_R \\ &\quad - \frac{1}{12} \operatorname{sech}^2 t_R \operatorname{artanh} \left( \frac{\sqrt{-\frac{1}{2} + \sinh^2 t_R}}{\sinh t_R} \right) \\ &\quad - \sinh t_R \sqrt{-\frac{1}{2} + \sinh^2 t_R} \left[ \frac{2}{9} - \frac{1}{2} \operatorname{sech}^2 t_R \right]. \end{aligned}$$

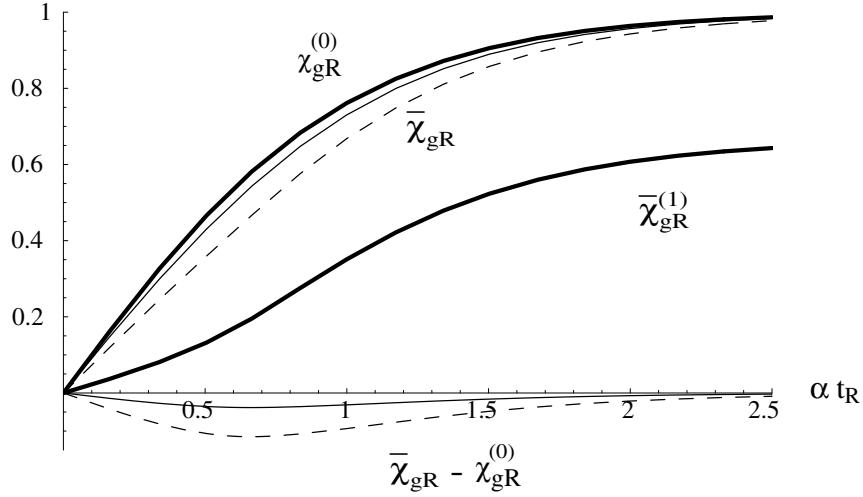


Abb. 2.3: Alternative Darstellung des Grenzflächenprofils:  
Treelevel-Funktion  $\chi_{gR}^{(0)}$ , 1-Loop-Funktion  $\bar{\chi}_{gR}^{(1)}$  (dick) Gesamtprofil  $\bar{\chi}_{gR}$  und 1-Loop-Beitrag  $\bar{\chi}_{gR} - \chi_{gR}^{(0)}$  für  $u_R = 5$  (dünn) und  $u_R = 15$  (gestrichelt).

Eine graphische Darstellung obiger Funktionen zeigt Abb. 2.2. Während der 1-Loop-Beitrag  $\chi_{gR} - \chi_{gR}^{(0)}$  mit zunehmendem  $u_R$  an Bedeutung gewinnt, ändert sich selbst für große Werte des Entwicklungsparameters  $u_R = 15$  die Form des Grenzflächenprofils durch die 1-Loop-Ordnung qualitativ kaum.

### Alternative Darstellung

Durch Umstellen der Reihenentwicklung in  $u_R$  lässt sich das Ergebnis aus dem vorigen Abschnitt so umschreiben, dass Teile der 1-Loop-Ordnung bereits im Treelevel enthalten sind. Für die Störungsreihe des Grenzflächenprofils ergibt sich dann

$$\begin{aligned}\phi_{gR}(z) &= \sqrt{\frac{3m_R}{u_R}} \bar{\chi}_{gR}(z) \\ &= \sqrt{\frac{3m_R}{u_R}} A(u_R) \left\{ \chi_{gR}^{(0)}(\alpha(u_R)t_R) + \frac{u_R}{8\pi} \bar{\chi}_{gR}^{(1)}(\alpha(u_R)t_R) + \mathcal{O}(u_R^2) \right\},\end{aligned}$$

wobei der 1-Loop-Beitrag

$$\bar{\chi}_{gR}^{(1)}(t_R) = \begin{cases} \bar{\chi}_{gR}^{(1)}(t_R) & \text{für } |t_R| \leq t_g \\ \bar{\chi}_{gR}^{(1)}(t_R) & \text{für } |t_R| \geq t_g \end{cases}$$

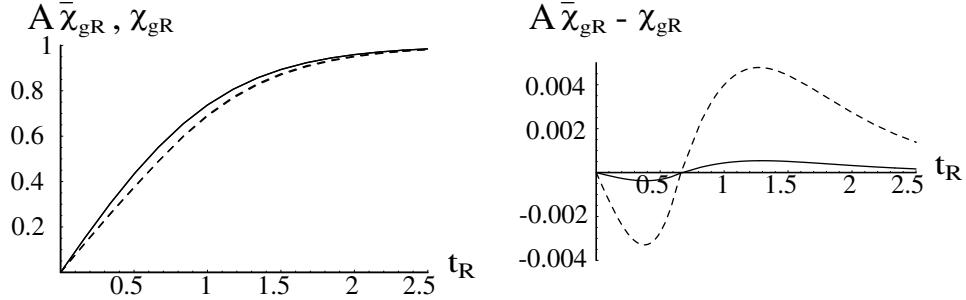


Abb. 2.4: Vergleich der ursprünglichen Darstellung  $\chi_{gR}$  und der alternativen Darstellung  $A \bar{\chi}_{gR}$  des Grenzflächenprofils: links die beiden Profile, rechts ihre Differenz, jeweils für  $u_R = 5$  (durchgezogen) und  $u_R = 15$  (gestrichelt)

die folgenden, nun etwas einfacheren Termen enthält:

$$\begin{aligned}\bar{\chi}_{gR<}^{(1)}(t_R) &= \frac{2}{9} \sinh t_R \cosh t_R \\ \bar{\chi}_{gR>}^{(1)}(t_R) &= \frac{2}{9} \sinh t_R \cosh t_R - \frac{1}{12} \operatorname{sech}^2 t_R \operatorname{artanh} \left( \frac{\sqrt{-\frac{1}{2} + \sinh^2 t_R}}{\sinh t_R} \right) \\ &\quad - \sinh t_R \sqrt{-\frac{1}{2} + \sinh^2 t_R} \left[ \frac{2}{9} - \frac{1}{2} \operatorname{sech}^2 t_R \right]\end{aligned}$$

Die restlichen Terme der ursprünglichen Version aus Gleichung (2.39) sind enthalten in der kopplungsabhängigen Umskalierung des Arguments

$$\alpha(u_R) = 1 + \frac{1}{12} \left( \frac{u_R}{8\pi} \right) + \mathcal{O}(u_R^2)$$

und der ebenfalls kopplungsabhängigen Gesamtamplitude

$$A(u_R) = 1 - \frac{2}{3} \left( \frac{u_R}{8\pi} \right) + \mathcal{O}(u_R^2). \quad (2.41)$$

Abb. 2.3 zeigt die alternative Darstellung des Grenzflächenprofils. Trotz der nun qualitativ sehr anderen Form der 1-Loop-Funktion  $\bar{\chi}_{gR}^{(1)}$  sorgt der Gesamtfaktor  $A(u_R)$  dafür, dass der 1-Loop-Beitrag  $\bar{\chi}_{gR}^{(1)} - \chi_{gR}^{(0)}$  dem der ursprünglichen Darstellung sehr ähnlich ist. Die beiden Darstellungen sind sogar kaum zu unterscheiden, s. Abb. 2.4. Ihre Differenz steigt, wie zu erwarten, mit  $u_R$  an, bleibt aber selbst für den großen Wert  $u_R = 15$  noch klein. Im Folgenden soll deshalb hauptsächlich mit der einfacheren alternativen Darstellung gearbeitet werden.

## 2.4 Fluktuationen in Landau- und $\phi^4$ -Theorie

Die in den letzten Abschnitten berechneten Grenzflächenprofile der Landau- bzw.  $\phi^4$ -Theorie in 1-Loop-Ordnung sind Näherungen, die nicht alle thermischen Fluktuationen der Grenzflächen berücksichtigen.

Beide Theorien beschreiben einen Ordnungsparameter, der aus einer mikroskopischen Theorie durch **Grobkörnung** entsteht (Abschnitt 2.2.1), die mikroskopische Fluktuationen wegmittelt. Die Fourier-Transformierte des Ordnungsparameters enthält damit nur Wellenlängen

$$\lambda > a,$$

die größer als eine mikroskopische Länge  $a$  (Gitterkonstante) sind.

Die **Landau-Theorie** ist eine **Mean-field**-Näherung, d. h. in einer Umgebung  $B_{\text{intr}}^3$  von der Reichweite der molekularen Wechselwirkung um ein Molekül wird die Wechselwirkung mit den anderen Molekülen ersetzt durch ein von diesen Molekülen erzeugtes mittleres Feld. Damit wird angenommen, dass sich in einer solchen Umgebung immer dieselbe Zahl von Molekülen befindet. Effektiv werden damit alle Fluktuationen größer als  $B_{\text{intr}}$  vernachlässigt. Dies sieht man auch, wenn man die Landau-Mean-field-Näherung in systematischer Weise mit einer Sattelpunktsentwicklung aus der  $\phi^4$ -Theorie ableitet (Abschnitt 2.3), wobei alle Fluktuationen um das Sattelpunktsprofil vernachlässigt werden. Die Korrelationslänge  $\xi$  beschreibt aber gerade die Reichweite der im Sattelpunktsprofil enthaltenen Fluktuationen, so dass die Landau-Theorie nur Fluktuationen

$$\lambda < B_{\text{intr}} \sim \xi$$

kleiner als ein Cutoff  $B_{\text{intr}}$ , der von der Größenordnung der Korrelationslänge ist, berücksichtigt. Insgesamt enthält die Landau-Mean-field-Theorie also Fluktuationen zwischen:

$$a < \lambda < B_{\text{intr}} \sim \xi \quad (2.42)$$

Damit ist jedoch nicht gesagt, dass *alle* Fluktuationen dieses Größenbereichs berücksichtigt werden. Man kann aber hoffen, zumindest die wichtigsten Fluktuationen dieses Größenbereichs in der Mean-field-Theorie mitgenommen zu haben.

Die  **$\phi^4$ -Theorie** beschreibt mit dem Pfadintegral

$$\int \mathcal{D}\phi e^{-S[\phi]}$$

alle möglichen Fluktuationen des Ordnungsparameters  $\phi$ . In der **Sattelpunktsentwicklung** werden diese Fluktuationen nach Ordnungen von  $\hbar$  „sortiert“, wobei die nullte Ordnung der Landau-Theorie entspricht. In der Quantenfeldtheorie entspricht dies der Berücksichtigung von Quantenfluktuationen um die klassische Theorie bei  $\hbar = 0$ . In der Statistischen Physik beschreiben die höheren Ordnungen wegen  $\hbar \simeq k_B T$  thermische Fluktuationen, wobei jedoch unklar ist, welche „realen“ Grenzflächenfluktuationen den einzelnen Ordnungen entsprechen.

In der **1-Loop-Ordnung** der Sattelpunktsentwicklung werden nur Terme der Ordnung  $\mathcal{O}(\hbar)$  mitgenommen. Zusätzlich wird die **lokale Potenzial-Approximation** (2.33) gemacht. Damit erhält man wieder ein Mean-fieldartiges Profil, das nur Fluktuationen im Bereich

$$a < \lambda < B_{\text{intr}} \sim \xi,$$

berücksichtigt, die kleiner sind als ein Cutoff  $B_{\text{intr}}$  von der Größenordnung der in diesen beiden Approximationen berechneten Korrelationslänge.

Die Mean-field-Näherung ist für Grenzflächen in der Nähe des kritischen Punktes problematisch, da dort Fluktuationen auf allen Größenskalen auftreten. Zusätzlich zu diesem Zusammenbruch der Mean-field-Näherung nahe am kritischen Punkt hat man beim Vorhandensein einer Grenzfläche aber schon weit unterhalb der kritischen Temperatur **langwellige Fluktuationen** der Grenzfläche, die von der Mean-field-Theorie nicht erfasst werden. Ein Modell für diese Grenzflächen-Fluktuationen wird im nächsten Kapitel vorgestellt.

# Kapitel 3

## Kapillarwellen-Theorie

Die Kapillarwellen-Theorie, die 1965 von Buff, Lovett und Stillinger [BLS65] vorgeschlagen wurde, beschreibt die langwelligen Fluktuationen der Grenzfläche. Diese „Kapillarwellen“ entsprechen den Goldstone-Bosonen, die dadurch entstehen, dass die Grenzfläche die Translationsinvarianz des Systems bricht.

Die anschauliche Vorstellung der Grenzfläche in diesem Modell ist eine schwingende „Membran“  $z = h(x, y)$ , wie sie in nebenstehender Abbildung

zu sehen ist. Im Gegensatz zur Mean-field-Theorie des letzten Kapitels ergibt sich also eine scharfe Grenzfläche zwischen den zwei Phasen. Durch Fluktuationen dieser scharfen Grenzfläche entsteht aber dennoch eine Grenzschicht mit kontinuierlichem Profil und endlicher Dicke. Bei der Beschreibung mit einer eindeutigen Funktion  $h(x, y)$  werden Überhänge sowie eine innere Struktur der Grenzfläche vernachlässigt. Es wird angenommen, dass sich diese Effekte auf der makroskopischen Skala, für die das Kapillarwellen-Modell gedacht ist, zusammenfassen lassen in einem einzigen makroskopischen Parameter, der Oberflächenspannung.

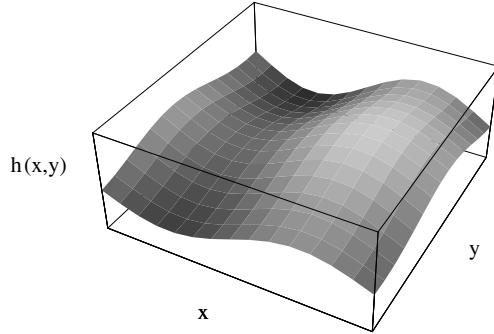


Abb. 3.1: Grenzfläche als schwingende Membran.

### 3.1 Kapillarwellen-Energie

Die Freie Energie  $\mathcal{H}_{\text{Grenze}}[h]$  einer bestimmten Membran-Konfiguration  $h(x, y)$  wurde von Buff, Lovett und Stillinger phänomenologisch hergeleitet als Arbeit gegen die Oberflächenspannung  $\tau = \frac{\sigma}{\beta}$ , die durch das Produkt aus Oberflächenspannung und Fläche  $A_h$  gegeben ist:

$$\beta \mathcal{H}_{\text{Grenze}}[h] = \beta \tau A_h = \sigma \int dx dy \sqrt{1 + (\nabla h(x, y))^2}$$

Davon wird die Freie Energie der homogenen Phase

$$\beta \mathcal{H}_{\text{homogen}} = \beta \tau A_{h=0} = \sigma \int dx dy$$

abgezogen, so dass man für die Freie Energie der Membran-Konfiguration  $h(x, y)$  erhält:

$$\begin{aligned} \beta \mathcal{H}_{\text{KW}}[h] &= \beta (\mathcal{H}_{\text{Grenze}}[h] - \mathcal{H}_{\text{homogen}}) \\ &= \sigma \int dx dy \left\{ \sqrt{1 + (\nabla h(x, y))^2} - 1 \right\} \end{aligned} \quad (3.1)$$

Neben dieser phänomenologischen Herleitung sind formale Herleitungen möglich:

- Weeks [We77] leitet die Kapillarwellen-Energie (3.1) in einem Grobkörnungsverfahren aus einer mikroskopischen Hamilton-Funktion ab, indem er das System in Blöcke der Seitenlänge  $B$  (mit  $\xi \sim B \ll L$ ) und der Höhe  $D$  unterteilt. Für eine gegebene Konfiguration wird im  $n$ -ten dieser Blöcke die Grenzflächen-Position  $h_n$  als Gibbssche Grenzfläche durch die Anzahl der Teilchen in diesem Block bestimmt. Gibt man nun eine Konfiguration  $\{h_n\}$  vor und integriert alle anderen Freiheitsgrade aus der Zustandssumme aus, so erhält man eine Oberflächen-Hamiltonfunktion, die im Kontinuumslimes in (3.1) übergeht. Auf den Ideen dieser Herleitung beruht das später in der Monte-Carlo-Simulation verwendete Messverfahren.
- Safran [Sa94] leitet die Kapillarwellen-Energie (3.1) aus der  $\phi^4$ -Theorie ab, indem er für den Ordnungsparameter  $\phi$  den Ansatz  $\phi(x, y, z) = \chi((x, y, z) - (x, y, h(x, y)) \cdot \vec{n}(x, y))$  macht, wobei  $\vec{n}(x, y)$  der Einheitsnormalenvektor an die Fläche  $h(x, y)$  ist. Unter den Annahmen, dass die Funktion  $\chi$  die Landau-Energie minimiert (d. h. dass sie gleich dem Landau-intrinsischen Profil ist) und dass die räumliche Variation in  $z$ -Richtung stärker ist als in  $x$ - bzw.  $y$ -Richtung (so dass Ableitungen erster Ordnung in  $x$  und  $y$  und zweiter Ordnung in  $z$  vernachlässigt werden können), ergibt sich (3.1) als Energie der Membran-Konfiguration  $h(x, y)$ .

Die Kapillarwellen-Theorie soll **langwellige Grenzflächen-Fluktuationen kleiner Amplitude** beschreiben. In der Freien Energie (3.1) kann folglich eine Gradientenentwicklung durchgeführt werden:

$$\beta \mathcal{H}_{\text{KW}}[h] \approx \frac{\sigma}{2} \int dx dy (\nabla h(x, y))^2$$

(3.2)

Eine Fourier-Transformation liefert dann eine Beschreibung der Grenzfläche durch entkoppelte harmonische Oberflächenwellen, in der Mittelwerte analytisch berechnet werden können.

### 3.2 Verteilung der Grenzflächen-Positionen

Für die Wahrscheinlichkeit  $P(h)$ , dass die Grenzfläche an einem beliebigen Punkt  $(x, y)$  die Höhe  $z = h(x, y) = h$  hat, ergibt sich eine Normalverteilung

$$P(h) = \langle \delta(h(x, y) - h) \rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi}s} e^{-h^2/2s^2} \quad (3.3)$$

mit Varianz

$$s^2 = \langle h^2 \rangle = \frac{1}{2\pi\sigma} \int dq \frac{1}{q}. \quad (3.4)$$

Als mittlere quadratische Fluktuation  $\langle h^2 \rangle$  der Membran charakterisiert diese Varianz die Dicke der Grenzfläche, die durch Fluktuationen hervorgerufen wird.

Das Fourier-Integral in (3.4) divergiert sowohl für  $q \rightarrow 0$  als auch für  $q \rightarrow \infty$ . Beide Divergenzen werden durch Cutoffs vermieden. Dabei ist der untere Cutoff  $q > 2\pi/L$  unproblematisch, da er durch die Endlichkeit des Systems bestimmt wird. Der obere Cutoff  $q < 2\pi/B_{KW}$  hingegen ist problematisch, da die genaue Größe von  $B_{KW}$  unklar ist. Die Kapillarwellen-Theorie beschreibt die Grenzfläche als scharf, d. h. sie vernachlässigt den kontinuierlichen Übergang zwischen den zwei Phasen, der, wie im letzten Kapitel beschrieben, auf der Größenskala der Korrelationslänge stattfindet. Also sollte

$$B_{KW} \sim \xi$$

gelten. Insgesamt werden also Fluktuationen mit Wellenlängen

$$\xi \sim B_{KW} < \lambda < L \quad (3.5)$$

berücksichtigt, und man hat für die Varianz:

$$s^2 = \frac{1}{2\pi\sigma} \int_{2\pi/L}^{2\pi/B_{KW}} dq \frac{1}{q} = \frac{1}{2\pi\sigma} \ln \frac{L}{B_{KW}} \quad (3.6)$$

Auch in der oben erwähnten Herleitung von Weeks erhält man dieses Ergebnis. Der Faktor  $\frac{1}{2\pi\sigma}$  stammt dabei aus Fluktuationen der Grenzflächenpositionen zweier benachbarter Blöcke. Er charakterisiert damit die lokale Dicke der Grenzfläche und ist wegen  $\sigma^{-1} \sim \xi^2$  (vgl. (2.9)) proportional zum Quadrat der Korrelationslänge. Der logarithmische Faktor  $\ln \frac{L}{B_{KW}}$  stammt hingegen aus Fluktuationen weit auseinander liegender Blöcke und charakterisiert die Verbreiterung der Grenzfläche durch die langwelligen Kapillarwellen-Fluktuationen. Er hängt nicht von systeminternen Größen (wie etwa  $\sigma, \xi$ ) ab, dafür aber von externen Parametern wie der Systemlänge  $L$ .

Die Varianz  $s^2$  divergiert nach (3.6) im thermodynamischen Limes  $L \rightarrow \infty$ ; diese Infrarot-Divergenz ist eine physikalische Divergenz, die daher röhrt, dass langwellige Moden fast keine Energie „kosten“. Für die Nullmode  $q = 0$  ist dies sehr anschaulich: sie entspricht dem Wandern der Grenzfläche ohne Verformung; aufgrund der Translationsinvarianz des Systems wird hierzu keine Energie benötigt.

### 3.3 Grenzflächenprofil

Wie bereits erwähnt ist die Grenzfläche im Kapillarwellen-Modell eine scharfe Grenzfläche zwischen den homogenen Phasen  $\pm v_0$ :

$$\phi_g(z - h(x, y)) = v_0 \operatorname{sgn}(z - h(x, y)) = \begin{cases} +v_0 & \text{für } z > h(x, y) \\ -v_0 & \text{für } z < h(x, y) \end{cases}$$

Dabei ist  $h = h(x, y)$  die Höhe der Grenzfläche am Punkt  $(x, y)$ . Diese ist aber nach (3.3) gerade normalverteilt, so dass man für das mittlere Profil erhält:

$$\begin{aligned} \phi_{\text{KW}}(z) &= \int dh \phi_g(z - h) P(h) = \int dh v_0 \operatorname{sgn}(z - h) \frac{1}{\sqrt{2\pi}s} e^{-h^2/2s^2} \\ &= v_0 \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^{z/\sqrt{2}s} dh e^{-h^2} = \boxed{v_0 \operatorname{erf}\left(\frac{z}{\sqrt{2}s}\right)} = \phi_{\text{KW}}(z) \end{aligned} \quad (3.7)$$

Dieses Fehlerfunktion-Profil hat einen qualitativ ähnlichen Verlauf wie das Tangens-hyperbolicus-Profil der Landau-Mean-field-Theorie des letzten Kapitels. Ein wesentlicher Unterschied besteht jedoch darin, dass die Dicke des Profils (3.7) mit der Varianz  $s^2$  und damit mit dem Logarithmus der Systemlänge  $L$  skaliert:

$$w^2 \sim s^2 \sim \ln L$$

# Kapitel 4

## Faltungsnäherung

In den letzten beiden Kapiteln wurden zwei Theorien zur Beschreibung von Grenzflächen vorgestellt: die Mean-field-Theorie für Fluktuationen im Bereich  $a < \lambda < B_{\text{intr}} \sim \xi$  und die Kapillarwellen-Theorie für Fluktuationen im Bereich  $\xi \sim B_{\text{KW}} < \lambda < L$ . Die beiden Theorien ergänzen sich damit sehr gut zur Beschreibung einer „realen“ Grenzfläche, die natürlich *alle* Fluktuationen zeigt.

### 4.1 Gesamtprofil

Die einfachste Möglichkeit, die beiden Theorien zu kombinieren, ist die **Faltungsnäherung**, in der angenommen wird, dass die Fluktuationen aus Mean-field- und Kapillarwellen-Theorie nicht wechselwirken. Die anschauliche Vorstellung dabei ist, dass das intrinsische Profil  $\phi_g(z)$  der Mean-field-Theorie an die schwingende Membran  $h(x, y)$  der Kapillarwellen-Theorie „geheftet“ ist, so dass sich ein momentanes Grenzflächen-Profil  $\phi_g(z - h(x, y))$  ergibt. Das mittlere Gesamtprofil  $c$  ist dann die **Faltung** des intrinsischen Profils  $\phi_g(z)$  mit der Grenzflächenpositions-Verteilung  $P(h)$ :

$$c(z) = \langle \phi_g(z - h) \rangle = \int dh \phi_g(z - h) P(h) = \phi_g(z) * P(z) \quad (4.1)$$

Die angenommene Unabhängigkeit der Mean-field- und Kapillarwellen-Fluktuationen kommt darin zum Ausdruck, dass das Mean-field-Mittel (für  $\phi_g$ ) und das Kapillarwellen-Mittel (für  $P$ ) getrennt ausgeführt und dann in (4.1) kombiniert werden können.

Einen Vergleich der theorieabhängigen Vorstellung der Grenzfläche zeigt Abb. 4.1. In der Mean-field-Theorie hat man eine diffuse Grenzfläche mit einem stetigen Profil, das nur in  $z$ -Richtung variiert (links). Die Kapillarwellen-Theorie hingegen nimmt eine scharfe, aber schwingende Grenzfläche zwischen den zwei Phasen an (Mitte). Die Faltungsnäherung schließlich kombiniert die beiden Beschreibungen, indem sie das stetige Profil der Mean-field-Theorie an die schwingende Membran der Kapillarwellen-Theorie „heftet“ (rechts). Abb. 4.1 zeigt dabei für die Mean-field-Theorie das gemittelte Profil (über ein momentanes Profil macht diese Theorie keine Aussage), während für die Kapillarwellen-Theorie eine Momentaufnahme und für die Faltungsnäherung eine Mischform

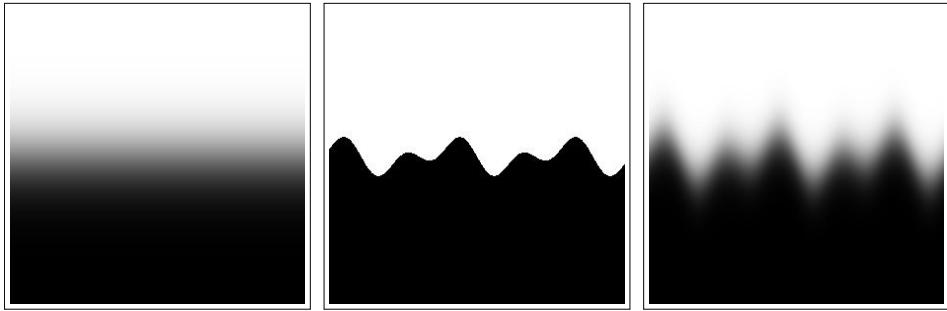


Abb. 4.1: Anschauliche Vorstellung der Grenzschicht in Mean-field-Theorie (links), Kapillarwellen-Theorie (Mitte) und Faltungsnäherung (rechts).

(gemitteltes intrinsisches Profil an momentaner Membran) zu sehen ist. Nach Mittelung würden alle Theorien ein Bild liefern, dass qualitativ wie die Grenzschicht der Mean-field-Theorie in Abb. 4.1 links aussieht, jedoch mit jeweils verschiedenenem funktionalen Verlauf des stetigen Grenzflächenprofils.

Um die Anzahl der Parameter zu vermindern, werden einige **Umskalierungen** vorgenommen. Zunächst wird  $v_0 = 1$  gesetzt, so dass die homogenen Phasen  $\pm 1$  sind und das Grenzflächenprofil den Randbedingungen

$$c(z \rightarrow \pm\infty) \rightarrow \pm 1$$

genügt. Dann liefert eine Umskalierung auf die dimensionslosen Variablen  $z$  und  $s$

$$\frac{m_R}{2} z \rightarrow z, \quad \frac{m_R}{2} s \rightarrow s \quad (4.2)$$

das Gesamtprofil als Funktion nur noch eines (neuen) Parameters  $s$ :

$$c(z) = \phi_g(z) * P(z, s) \quad (4.3)$$

### Treelevel

Nimmt man für das intrinsische Profil  $\phi_g$  das Treelevel-Profil aus Abschnitt 2.3.2, so erhält man für das Gesamtprofil

$$c(z) = \tanh(z) * \mathcal{N}(0, s^2)(z),$$

das für  $s = \frac{1}{2} \cdot n$ , ( $n = 1, \dots, 6$ ) in nebenstehender Abbildung dargestellt ist. Die Faltung mit der Normalverteilung

$$\mathcal{N}(0, s^2) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}s} \exp(-z^2/2s^2)$$

bewirkt eine Verbreiterung des intrinsischen Profils, wobei die qualitative Form des Profils im Wesentlichen erhalten bleibt. Das Hinzufügen von Kapillarwellen-Fluktuationen zum intrinsischen Profil bewirkt also ein „**Ausschmieren**“ dieses intrinsischen Profils.

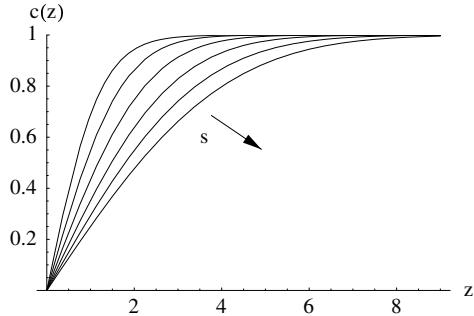


Abb. 4.2: Ausschmierung des intrinsischen Treelevel-Profils.

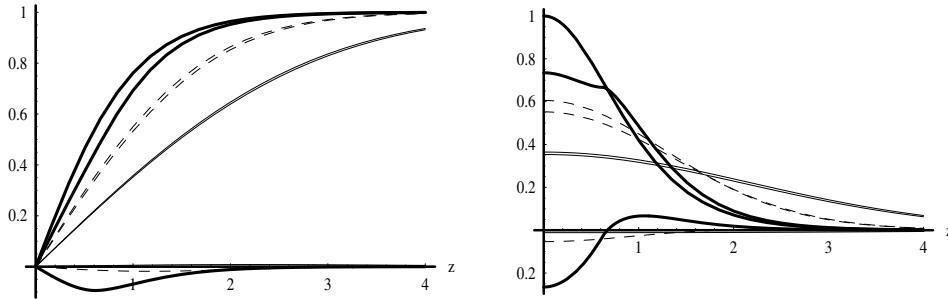


Abb. 4.3: Ausgeschmierte Profilfunktionen in 1-Loop-Ordnung für  $s = 0$  (dick),  $s = 1$  (gestrichelt) und  $s = 2$  (dünn):

links: Treelevel-Profil  $c^{(0)}$  (jeweils oben), 1-Loop-Beitrag  $c^{(1)}$  (jeweils unten) und Gesamtprofil  $c$  (jeweils mittleres Profil) für  $u = 15$

rechts: dasselbe für die Ableitungen der Profilfunktionen

### 1-Loop-Ordnung

Nimmt man für  $\phi_g$  das Profil in alternativer Darstellung aus Abschnitt 2.3.3 in 1-Loop-Ordnung in  $\mathcal{O}(u_R)$ :

$$\phi_g(z) = A(u_R)\chi_{gR}^{(0)}(\alpha(u_R)z) + \frac{u_R}{8\pi}\chi_{gR}^{(1)}(\alpha(u_R)z),$$

so ergibt sich Abb. 4.3. Auch hier bewirkt die Ausschmierung eine Verbreiterung des Profils, man erkennt aber auch, dass bei stärkerer Ausschmierung (größere  $s$ ) die genaue Profilform eine immer geringere Rolle spielt (Treelevel- und 1-Loop-Profile unterscheiden sich immer weniger). Dies liegt am

## 4.2 Grenzverhalten

für große Standardabweichungen  $s \rightarrow \infty$ . In diesem Fall erscheint das intrinsische Grenzflächenprofil  $\phi_g$  gegenüber der extrem breiten Gaußglocke  $\mathcal{N}(0, s^2)$  in der Faltung (4.3) als so dünn, dass es als eine scharfe Stufe angenommen werden kann:

$$\phi_g(z - h) = \text{sgn}(z - h)$$

Man erhält damit wieder den Fall der Kapillarwellen-Theorie (Abschnitt 3.3):

$$c(z) \xrightarrow{s \rightarrow \infty} \text{sgn}(z) * \mathcal{N}(0, s^2) = \text{erf}\left(\frac{z}{\sqrt{2}s}\right), \quad (4.4)$$

unabhängig von der Form des intrinsischen Profils. Für große  $s$  wird der Einfluss der Kapillarwellen-Fluktuationen also derart stark, dass sie allein die Form des Grenzflächenprofils bestimmen.

Für kleine Standardabweichungen  $s \rightarrow 0$  ist die Gaußsche Normalverteilung eine Darstellung der Delta-Funktion:

$$P(h) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}s} e^{-h^2/2s^2} \xrightarrow{s \rightarrow 0} \delta(h),$$

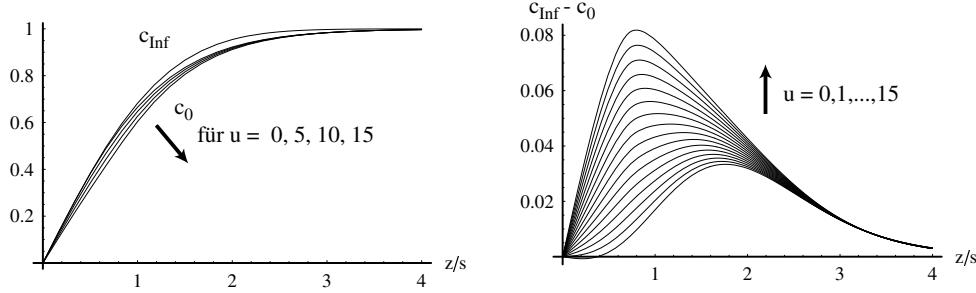


Abb. 4.4: Profile  $c_{\text{Inf}}$  und  $c_0$  (links) und ihre Differenz (rechts).

und das Gesamtprofil aus (4.3) geht über in das intrinsische Grenzflächenprofil:

$$c(z) \xrightarrow{s \rightarrow 0} \phi_g(z). \quad (4.5)$$

Physikalisch gesehen entspricht dies dem Sachverhalt, dass ohne Kapillarwellen-Fluktuationen ( $s = 0$ ) das intrinsische Grenzflächenprofil nicht verändert wird.

### 4.3 Einfluss der Kapillarwellen auf die Profilform

Die Kapillarwellen-Fluktuationen bewirken eine Abweichung von der Profilform des intrinsischen Profils. Maximal wird diese Abweichung für große  $s \rightarrow \infty$ . Deshalb wird in Abb. 4.4 das Profil für große  $s$

$$c_{\text{Inf}}(z) := \text{erf}\left(\frac{1}{\sqrt{2}} \frac{z}{s}\right)$$

verglichen mit dem intrinsischen Profil

$$c_0(z) := \phi_g\left(\sqrt{\frac{\pi^2 - 6}{6}} \frac{z}{s}\right),$$

das durch den Faktor  $\sqrt{\frac{\pi^2 - 6}{6}} \frac{1}{s}$  dieselbe Dicke wie das Profil  $c_{\text{Inf}}$  hat. (Dabei wurde die Dicke nach der Definition 2c) aus dem nächsten Kapitel 5.1 berechnet.) Die Abweichung nimmt mit wachsendem  $u$  zu, bleibt jedoch stets klein. Es ist also nicht zu erwarten, dass in einer Simulation oder einem Experiment Kapillarwellen- und intrinsisches Regime anhand der funktionalen Profilform unterschieden werden können.

# Kapitel 5

## Grenzflächendicke

### 5.1 Definition der Grenzflächendicke

Ist ein kontinuierliches Profil  $c(z)$  wie auf nebenstehender Abbildung für eine Grenzschicht gegeben, so gibt es verschiedene Möglichkeiten, die Dicke  $w$  dieses Profils zu definieren. Einige Definitionen sollen im Folgenden angegeben und miteinander verglichen werden. Dabei wird als intrinsisches Grenzflächenprofil das Treelevel-Profil aus Abschnitt 2.3.2 verwendet, d.h. (zusammen mit der Umskalierung (4.2)):

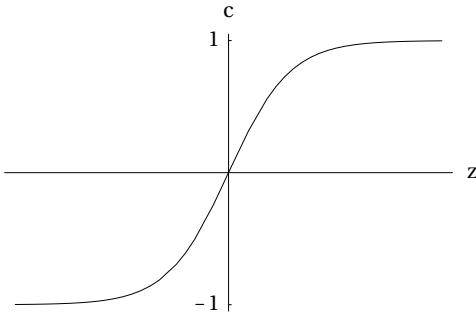


Abb. 5.1: Typische Profilform

$$\begin{aligned} c(z) &= \phi_g(z) * P(z) \\ &= \tanh(z) * \frac{1}{\sqrt{2\pi s}} \exp(-z^2/2s^2), \end{aligned} \tag{5.1}$$

Es wird das Verhalten der Dicke dieses Profils in Abhängigkeit von  $s$  betrachtet.

Die Definition der Dicke ist nicht eindeutig, sondern birgt immer eine gewisse Willkür. Alle Definitionen sollten aber gewährleisten, dass die Dicke mit steigender Varianz  $s$  zunimmt (vgl. die Diskussion in Abschnitt 4.1). Außerdem sollte sie im Grenzfall  $s \rightarrow 0$  gegen die Dicke des intrinsischen Profils, d.h. des  $\tanh(z)$ , und im Grenzfall  $s \rightarrow \infty$  gegen die Dicke der Fehlerfunktion  $\text{erf}(z/\sqrt{2}s)$  gehen. Da letztere mit  $s$  skaliert, sollte die Dicke für große  $s$  linear mit  $s$  anwachsen.

Zunächst werden einige Definitionen und ihr Grenzverhalten angegeben; dann werden die verschiedenen Definitionen verglichen.

#### 5.1.1 ad hoc-Definitionen

Man kann die Dicke eines Profils von obigem Typ ad hoc definieren als

**Definition 1a): Halbwertsbreite:**  $c(w_{1a}) \stackrel{!}{=} \frac{1}{2}$

Diese Definition ist allerdings nur für „nette“ Profile wie in Abb. 5.1 brauchbar, die sanft monoton ansteigen, so dass zum einen  $\frac{1}{2}$  nur einmal angenommen wird und zum anderen dies auch ein charakteristischer Wert ist. In den Grenzfällen  $s \rightarrow 0$  bzw.  $s \gg 1$  ist die Dicke nach dieser Definition

$$w_{1a} \rightarrow \begin{cases} \operatorname{artanh} \frac{1}{2} \approx 0.55 & \text{für } s \rightarrow 0 \\ \sqrt{2} \operatorname{erf}^{-1}\left(\frac{1}{2}\right) \cdot s \approx 0.67s & \text{für } s \gg 1. \end{cases}$$

Eine weitere ad hoc-Definition ist

**Definition 1b): Maximum der Krümmung:**  $c'''(w_{1b}) \stackrel{!}{=} 0$

Diese Definition wird beispielsweise in [Ja84] erwähnt; sie ist allerdings ebenfalls beschränkt auf Profile vom Typ der Abb. 5.1, die streng monoton steigend sind und keine „Buckel“ haben. In den Grenzfällen  $s \rightarrow 0$  bzw.  $s \gg 1$  ergibt sich das erwartete Grenzverhalten

$$w_{1b} \rightarrow \begin{cases} \operatorname{artanh} \frac{1}{\sqrt{3}} \approx 0.66 & \text{für } s \rightarrow 0 \\ s & \text{für } s \gg 1. \end{cases}$$

### 5.1.2 Definition als zweites Moment

Sinnvoller als durch solche ad hoc-Definitionen wird die Dicke als zweites Moment einer Verteilung  $p$  definiert:

$$w^2 := \langle z^2 \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} dz z^2 p(z).$$

Dabei ist  $p$  eine Funktion mit den Eigenschaften einer Wahrscheinlichkeitsdichte, die möglichst akkurat die Form des Profils wiedergibt. Es bieten sich folgende Definitionen für  $p$  an:

**Definition 2a):**  $p_{2a} \sim c'$

Diese Definition wird beispielsweise schon von [BLS65] verwendet. Die Differentiation stellt sicher, dass  $p_{2a}(\pm\infty) \rightarrow 0$  und die Form des Profils sehr gut berücksichtigt wird. Allerdings funktioniert diese Definition nur bei monoton steigenden Profilen, da sonst  $p_{2a}$  negativ wird. Mit Normierung hat man

$$p_{2a}(z) = \frac{1}{2} c'(z) = \frac{1}{2} \operatorname{sech}^2(z) * \frac{1}{\sqrt{2\pi}s} \exp(-z^2/2s^2).$$

Eine Berechnung über die charakteristische Funktion

$$\tilde{p}_{2a}(k) = \int dz p(z) e^{ikz} = \frac{\pi}{2} \frac{k}{\sinh(\frac{\pi}{2}k)} e^{-\frac{1}{2}s^2 k^2}$$

ergibt

$$w_{2a}^2 = \langle z^2 \rangle_{2a} = -\tilde{p}''(0) = \frac{\pi^2}{12} + s^2 \quad (5.2)$$

mit dem Grenzverhalten:

$$w_{2a} \rightarrow \begin{cases} \frac{\pi}{2\sqrt{3}} \approx 0.91 & \text{für } s \rightarrow 0 \\ s & \text{für } s \gg 1. \end{cases} \quad (5.3)$$

Gleichung (5.2) und (5.3) zeigen, dass bei dieser Definition der Grenzflächendicke die Gesamtdicke einfach die Summe aus intrinsischer und Kapillarwellen-Dicke ist:

$$w_{2a}^2 = w_{\text{intr}}^2 + w_{\text{KW}}^2$$

Dies liegt an der unabhängigen Kopplung der beiden zur Dicke beitragenden Effekte durch eine Faltung sowie an der „linearen“ Definition der Dicke über die Ableitung. Dies lässt sich leicht allgemein für ein Profil  $c = \phi_g * P$  mit einem beliebigen ungeraden intrinsischen Profil  $\phi_g(z)$  und einer beliebigen geraden Wahrscheinlichkeitsdichte  $P(h)$  nachrechnen.

**Definition 2b):**  $p_{2b} \sim 1 - c^2$

Diese Definition stellt wegen des Grenzverhaltens  $c(\pm\infty) = \pm 1$  das richtige Grenzverhalten  $p_{2b}(\pm\infty) = 0$  sicher. Sie gibt allerdings eine negative Dichte  $p_{2b}$ , falls das Profil betragsmäßig größer als 1 wird. Das Grenzverhalten ist

$$w_{2b} \rightarrow \begin{cases} \frac{\pi}{2\sqrt{3}} \approx 0.91 & \text{für } s \rightarrow 0 \\ \sqrt{\frac{5}{6}} \cdot s \approx 0.91 \cdot s & \text{für } s \gg 1. \end{cases} .$$

Für  $s \rightarrow 0$  ergibt sich derselbe Wert wie nach Definition 2a), da für das intrinsische Profil  $\phi_g(z) = \tanh z$  die Gleichung  $\tanh' = 1 - \tanh^2$  gilt.

**Definition 2c):**  $p_{2c} \sim c'^2$

Diese Definition ist physikalisch motiviert als Energiedichte  $\mathcal{E}$  für das intrinsische Profil. Für das effektive Potenzial  $V_{\text{eff}}$  aus (2.33) erhält man nach Integration über  $x, y$ , von denen  $\phi_g$  nicht abhängt:

$$\Gamma[\phi_g] = L^2 \int dz \left\{ V_{\text{eff}}(\phi_g(z)) + \frac{1}{2} \frac{1}{Z_3} (\phi'(z))^2 \right\} = L^2 \int dz \mathcal{E}(\phi_g(z))$$

Da für das Grenzflächenprofil  $\phi_g(z)$  die Bewegungsgleichung (2.35) gilt, ist die Energiedichte gegeben durch:

$$\mathcal{E}(\phi_g(z)) = V_{\text{eff}}(\phi_g(z)) + \frac{1}{2} \frac{1}{Z_3} (\phi'_g(z))^2 = 2V_{\text{eff}}(\phi_g(z)) = \frac{1}{Z_3} (\phi'_g(z))^2 \quad (5.4)$$

Überträgt man diese Argumentation ad hoc auf das Gesamtprofil  $c$ , so ist  $p_{2c} \sim c'^2$  proportional zur Energiedichte. Unter diesem Blickwinkel gesehen, sind die Definitionen 2a) und 2b) proportional zur Wurzel der Energiedichte. Bei 2a) ist dies offensichtlich nach (5.4), bei 2b) liegt dies an der Form  $V_{\text{eff}}(\phi) \sim (\phi^2 - 1)^2$  des Potenzials in Baumnäherung.

Die intrinsische Dicke lässt sich leicht berechnen:

$$w_{\text{intr}}^2 = \int dz z^2 N_{\text{intr}} (\phi'_g(z))^2 = \int dz z^2 \frac{3}{4} \frac{1}{\cosh^4 z} = \frac{\pi^2 - 6}{12},$$

ebenso die Kapillarwellen-Dicke:

$$w_{\text{KW}}^2 = \int dh h^2 N_{\text{KW}} \left( \operatorname{erf}'(z/\sqrt{2}s) \right)^2 = \int dh h^2 \frac{1}{\sqrt{\pi s}} e^{-\frac{h^2}{s^2}} = \frac{1}{2} s^2$$

Hierbei sind  $N_{\text{intr}}$  und  $N_{\text{KW}}$  Normierungsfaktoren für die Gewichtsfunktionen. Damit hat die Gesamtdicke das richtige Grenzverhalten:

$$w_{2c} \rightarrow \begin{cases} \sqrt{\frac{\pi^2 - 6}{12}} \approx 0.57 & \text{für } s \rightarrow 0 \\ \frac{1}{2} \sqrt{2} \cdot s \approx 0.71 \cdot s & \text{für } s \gg 1 \end{cases}$$

Es gilt aber nicht, dass wie bei Definition 2a) die Gesamtdicke einfach die Summe aus intrinsischer und Kapillarwellen-Dicke ist. Ursache ist die Nichtlinearität der Definition der Gewichtsfunktion als *Quadrat* der Ableitung. Die Zerlegung gilt aber in guter Näherung:

$$w_{2c}^2 \approx w_{\text{intr}}^2 + w_{\text{KW}}^2 =: w_{\text{unabh}}^2. \quad (5.5)$$

Dies sieht man wie folgt: Die Gewichtsfunktion nach Definition 2c) ist

$$p_{2c} = \frac{1}{N} (c'(z))^2 = \frac{1}{N} \int dh_1 \int dh_2 \phi'_g(z - h_1) \phi'_g(z - h_2) P(h_1) P(h_2)$$

mit dem Normierungsfaktor  $N = \int dz (c'(z))^2$ . Der Integrand enthält das Produkt der Gauß-Funktionen  $P(h_{1/2}) = \frac{1}{\sqrt{2\pi s}} \exp(-h_{1/2}^2/2s^2)$  an zwei verschiedenen Stellen  $h_1$  und  $h_2$ . Dieses Produkt ist immer fast Null, außer für  $h_1 = h_2$ . Mit dieser Näherung erhält man

$$p_{2c} \approx \frac{1}{N} \int dh (\phi'_g(z - h))^2 (P(h))^2.$$

Dieselbe Näherung im Normierungsfaktor führt auf (5.5).

Einsetzen der oben berechneten intrinsischen und Kapillarwellen-Dicke liefert:

$$w_{2c}^2 \approx w_{\text{unabh}}^2 = \frac{\pi^2 - 6}{12} + \frac{1}{2} s^2$$

(5.6)

Die Güte dieser Näherung zeigt Abb. 5.2, in der die relative Differenz zwischen der exakten Dicke  $w_{2c}$  und der Näherung  $w_{\text{unabh}}$  nach (5.6) aufgetragen ist. Die Abweichung ist stets kleiner als 3 Prozent und fast Null für kleine bzw. große  $s$ . Ihr Maximum nimmt sie im Bereich  $s \sim 1$  an.

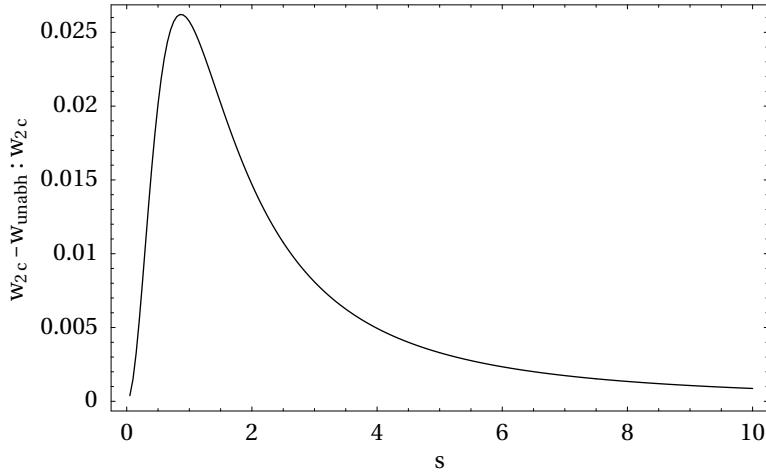


Abb. 5.2: Normierte Differenz  $(w_{2c} - w_{unabh})/w_{2c}$  zwischen der exakten, numerisch berechneten Dicke  $w_{2c}$  nach Definition 2c) und der Näherung  $w_{unabh}$  nach (5.6) in Abhängigkeit vom Parameter  $s$ .

**Definition 2d):**  $p_{2d} \sim \phi_g'^2 * P$

Diese Definition ist besonders gut der verwendeten Theorie angepasst, da sich die Gewichtsfunktion  $p_{2d}$  genau in der Art zusammensetzt wie auch das Grenzflächenprofil, nämlich als Faltung einer Größe der „intrinsischen“ Theorie (hier  $\phi_g'^2$ ) mit der Gauß-Verteilung  $P$  aus der Kapillarwellen-Theorie.

Eine genauere Betrachtung dieser Definition betont die Bedeutung der Wahrscheinlichkeitsdichte  $p_{2d}(z)$  als Wahrscheinlichkeit dafür, dass sich die Grenzfläche am Ort  $z$  befindet. Dabei setzt sich die Wahrscheinlichkeitsdichte  $p_{2d}$  aus zwei Wahrscheinlichkeitsdichten zusammen:

1. der Wahrscheinlichkeitsdichte  $P(h_1)$  dafür, dass sich die Grenzfläche nach dem Kapillarwellenmodell am Ort  $h_1$  befindet;
2. der Wahrscheinlichkeitsdichte  $\frac{3}{4}\phi_g'^2(h_2)$ , die nach der Argumentation zur Definition 2c) direkt proportional zur Energiedichte des intrinsischen Grenzflächenprofils  $\phi_g$  ist.

Die stochastisch unabhängige Kopplung dieser beiden Effekte liefert als Wahrscheinlichkeitsdichte dafür, dass sich die Grenzfläche am Ort  $z = h_1 + h_2$  befindet, die Faltung

$$p_{2d}(z) = \frac{3}{4}\phi_g'^2(z) * P(z) = \frac{3}{4} \int dh \phi_g'^2(z - h) * P(h).$$

Damit setzt diese Definition gerade die zwei „Zutaten“ der Theorie zur Beschreibung der Grenzfläche *unabhängig* zusammen, wie dies auch in Kapitel 4 vorausgesetzt wurde.

Eine Berechnung der Dicke über die charakteristische Funktion

$$\tilde{p}_{2d}(k) = \frac{\pi}{16} \frac{k(4 + k^2) e^{-\frac{1}{2}k^2 s^2}}{\sinh \frac{k\pi}{4} \cosh \frac{k\pi}{4}}$$

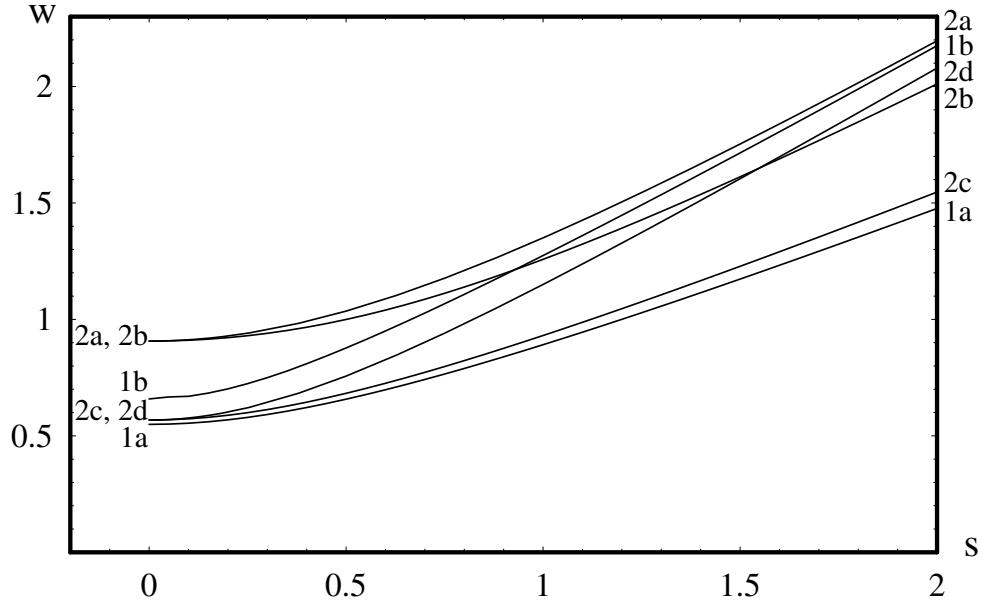


Abb. 5.3: Abhängigkeit der numerisch berechneten Dicken  $w$  von  $s$  nach den verschiedenen Definitionen aus Abschnitt 5.1.

ergibt

$$w_{2d}^2 = \langle z^2 \rangle_{2d} = -\tilde{p}''(0) = \frac{\pi^2 - 6}{12} + s^2$$

mit dem richtigen Grenzverhalten

$$w_{2c} \rightarrow \begin{cases} \sqrt{\frac{\pi^2 - 6}{12}} \approx 0.57 & \text{für } s \rightarrow 0 \\ s & \text{für } s \gg 1. \end{cases}$$

Da diese Definition für  $s \rightarrow 0$  mit Definition 2c) identisch ist, liefern beide Definitionen in diesem Fall dieselbe Dicke.

Hier gilt, wie bei Definition 2a), dass die Gesamtdicke die Summe aus intrinsischer Dicke und Kapillarwellen-Dicke ist:

$$w_{2d}^2 = w_{\text{intr}}^2 + w_{\text{KW}}^2$$

Angesichts der Definition über eine unabhängige Kopplung der beiden Effekte ist dies nicht weiter verwunderlich.

### 5.1.3 Vergleich der Definitionen

Alle betrachteten Definitionen haben ein qualitativ ähnliches Verhalten, s. Abb. 5.3: Für große  $s$  wachsen sie linear mit  $s$  an mit einer Steigung in der Größenordnung 1, für kleine  $s$  flachen sie etwas ab. Ein solches Verhalten zeigen sie jedoch nur bei „netten“ Profilen vom untersuchten Typ (5.1). Bei Profilen, die nicht monoton steigend sind, ist dies nicht mehr zu erwarten. Dann sind einige Dicken

sogar nicht mehr wohldefiniert, wie bereits oben bei ihrer Einführung diskutiert wurde. Am sinnvollsten erscheint deshalb die Verwendung von Definition 2c) oder 2d): sie definieren die Dicke als zweites Moment und berücksichtigen so sehr gut die Profilform; gleichzeitig haben sie eine physikalische Motivation als Energiedichte bzw. stochastisch unabhängige Kopplung der zwei theoretischen Ingredienzen der Theorie. Beide sind manifest positiv. Die Definition 2d) hat jedoch den gravierenden Nachteil, dass sie von den theoretischen Größen (wie dem intrinsischen Profil) des Modells abhängt und deshalb nicht universell verwendet werden kann. Insbesondere ist sie in einem Experiment und einer numerischen Simulation nicht anwendbar, da dort nicht a priori zwischen intrinsischer und Kapillarwellen-Dicke unterschieden werden kann. Im Folgenden wird deshalb in dieser Arbeit **Definition 2c) über das Gradient-Quadrat** verwendet.

In die Definition 2c) geht das Quadrat der Ableitung des Grenzflächenprofils ein; dieses ist numerisch weniger stabil als die einfache Ableitung der Definition 2a). Wohl aus diesem Grund wird in der Literatur in den meisten Fällen die Definition 2a) zur numerischen Berechnung der Dicke benutzt. Zu Vergleichszwecken wird deshalb in dieser Arbeit in den numerischen Rechnungen zur Monte-Carlo-Simulation zusätzlich die **Definition 2a) über den Gradienten** verwendet.

## 5.2 Dicke in 1-Loop-Ordnung

Im vorigen Abschnitt wurde bereits die Dicke der Grenzfläche in Treelevel-Ordnung bestimmt. Nun soll das intrinsische Profil in 1-Loop-Ordnung berücksichtigt werden; dabei wird der Index „ $R$ “ aus Abschnitt 2.3.3 im Folgenden fortgelassen.

Verwendet man für die Dicke  $w$  Definition 2c) aus Abschnitt 5.1, d. h.  $w^2 = \int dz z^2 p(z)$  mit der Gewichtsfunktion  $p \sim c'^2$ , so ergibt sich mit dem Profil  $c = \phi_g * P$  aus Abschnitt 4.3:

$$w^2 = \int dz z^2 p(z) = \frac{\int dz \int dh_1 \int dh_2 z^2 \phi'_g(h_1) \phi'_g(h_2) P(z - h_1) P(z - h_2)}{\int dz \int dh_1 \int dh_2 \phi'_g(h_1) \phi'_g(h_2) P(z - h_1) P(z - h_2)}$$

Setzt man für  $P$  die Gauß-Verteilung aus Abschnitt 3.2 ein, so lässt sich die  $z$ -Integration ausführen:

$$w^2 = \frac{s^2}{2} + \frac{\int dh_1 \int dh_2 \left(\frac{h_1+h_2}{2}\right)^2 e^{-\frac{1}{s^2} \frac{h_1-h_2}{2}^2} \phi'_g(h_1) \phi'_g(h_2)}{\int dh_1 \int dh_2 e^{-\frac{1}{s^2} \frac{h_1-h_2}{2}^2} \phi'_g(h_1) \phi'_g(h_2)}.$$

Für das Produkt  $\phi'_g(h_1) \phi'_g(h_2)$  erhält man in 1. Ordnung in  $u$  mit der ursprünglichen Darstellung aus Unterabschnitt 2.3.3:

$$\phi'_g(h_1) \phi'_g(h_2) = \chi_g^{(0)\prime}(h_1) \chi_g^{(0)\prime}(h_2) + 2 \frac{u}{8\pi} \chi_g^{(0)\prime}(h_1) \chi_g^{(1)\prime}(h_2)$$

und mit der alternativen Darstellung aus 2.3.3:

$$\phi'_g(h_1) \phi'_g(h_2) = \chi_g^{(0)\prime}(\alpha(u)h_1) \chi_g^{(0)\prime}(\alpha(u)h_2) + 2 \frac{u}{8\pi} \chi_g^{(0)\prime}(\alpha(u)h_1) \bar{\chi}_g^{(1)\prime}(\alpha(u)h_2).$$

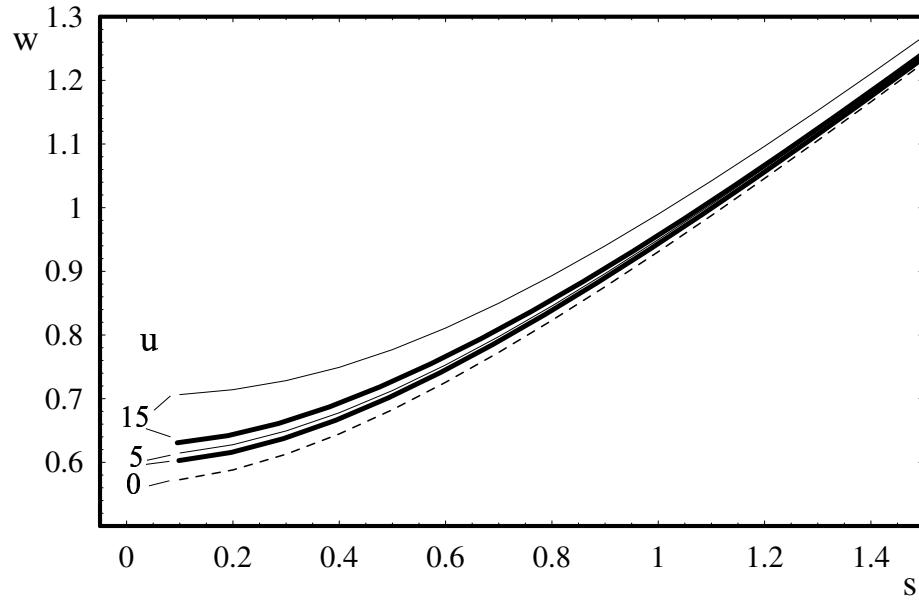


Abb. 5.4: Dicke  $w$  in Abhängigkeit von  $s$  für die ursprüngliche Version (dünn) und die alternative Version (dick), jeweils für  $u = 0$  (gestrichelt),  $u = 5$  und  $u = 15$

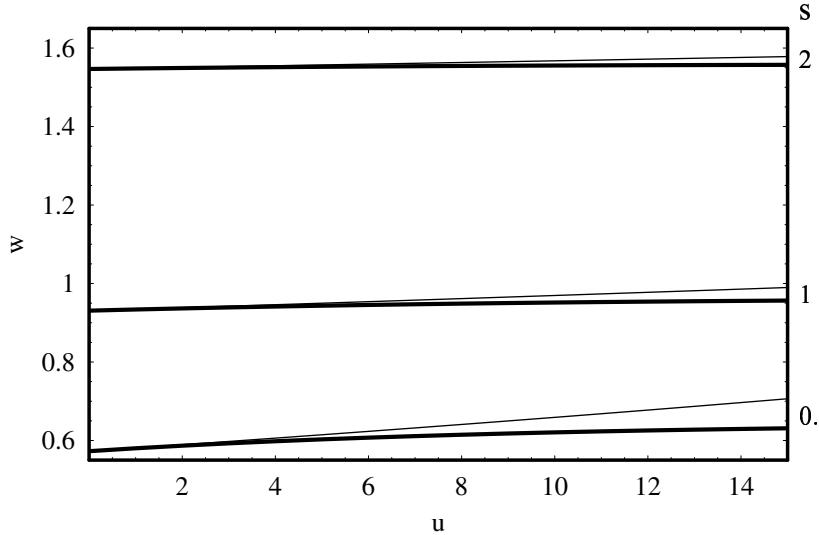


Abb. 5.5: Dicke  $w$  in Abhängigkeit von  $u$  für die ursprüngliche Version (dünn) und die alternative Version (dick), jeweils für  $s = 1/10, 1, 2$ .

Der Gesamt-Vorfaktor  $A(u)$  aus (2.41) wurde hier fortgelassen, da er bei der Normierung der Gewichtsfunktion wegfällt. Eine analytische Auswertung der 1-Loop-Dicken ist nicht möglich, weshalb im Folgenden die numerische Auswertung präsentiert wird.

Die Dicke  $w$  zeigt in 1-Loop-Ordnung eine qualitativ ähnliche Abhängig-

keit von der Standardabweichung  $s$  wie im Treelevel ( $u = 0$ ), s. Abb. 5.4, ist jedoch stets größer und nimmt mit  $u$  (d. h. mit steigendem Einfluss der 1-Loop-Ordnung) weiter zu. Dies liegt daran, dass der 1-Loop-Beitrag einerseits relativ klein ist, andererseits aber seinen maximalen Beitrag nicht wie das Treelevel-Profil bei 0, sondern weiter „außen“ hat; vgl. Abb. 4.3, in welcher der Verbreiterungseffekt des 1-Loop-Beitrags auch in der Ableitung und damit in der Gewichtsfunktion  $p \sim c'^2$  deutlich zu erkennen ist. Dieser Effekt wird durch die Ausschmierung mit  $P$  geringer: für große  $s$  gleichen sich alle Dicken an. Grund ist, dass für große  $s$  die genaue Form des intrinsischen Profils irrelevant wird, da das Gesamtprofil unabhängig davon die Form einer Fehlerfunktion (s. Abschnitt 4.2) mit der entsprechenden Dicke  $w = s/\sqrt{2}$  hat.

Eine Veränderung der Dicke durch den 1-Loop-Beitrag ist also nur für kleine  $s$  vorhanden; in diesem Bereich ist die Dicke offenbar sehr sensitiv auf die genaue Profilform. Dies sieht man besonders in Abb. 5.5, in der  $w$  sowohl für die ursprüngliche als auch für die alternative Darstellung von  $\phi_g$  in Abhängigkeit von  $u$  aufgetragen ist. Obwohl sich die beiden Darstellungen kaum unterscheiden (Abb. 2.4), unterscheiden sich die mit ihnen berechneten Dicken deutlich. Der Grund liegt in der Definition der Gewichtsfunktion  $p$  über die Ableitung, die sehr sensibel auf Veränderungen der Profilform reagiert, vgl. Abb. 4.3. Man kann also anhand der Dicken zwischen den verschiedenen Theorien unterscheiden.



**Teil II**

**Monte-Carlo-Simulation:**  
**Grenzflächen im**  
**3D-Ising-Modell**

# Kapitel 6

## Ziel und Methode

### 6.1 Theoretische Vorhersage

Im Teil I dieser Arbeit wurden drei Modelle zur Beschreibung von Grenzflächen vorgestellt, die in diesem Teil der Arbeit mit einer Monte-Carlo-Simulation untersucht werden. Dazu zunächst eine kurze Zusammenfassung der wichtigsten Vorhersagen der drei betrachteten Modelle:

- **Landau-Mean-field-Theorie** (Kapitel 2.1): Sie beschreibt die Grenzschicht als ein intrinsisches Profil

$$\phi_g(z) = \tanh\left(\frac{1}{2\xi}(z - h)\right) \quad (6.1)$$

mit der Dicke

$$w_{\text{intr}}^2 = c_{\text{intr}}\xi^2, \quad (6.2)$$

wobei  $c_{\text{intr}}$  ein Faktor der Größenordnung 1 ist, dessen genauer Wert von der Definition der Grenzflächen-Dicke über eine Gewichtsfunktion  $p$  abhängt:

$$c_{\text{intr}} = \begin{cases} \frac{\pi^2 - 6}{3} & \approx 1,3 \quad \text{für } p \sim \phi_g'^2 \\ \frac{\pi^2}{3} & \approx 3,3 \quad \text{für } p \sim \phi_g' \end{cases} \quad (6.3)$$

Die Mean-field-Theorie beschreibt dabei Fluktuationen der Größenordnung

$$a < \lambda < B_{\text{intr}} \sim \xi \quad (6.4)$$

mit einem mikroskopischen Cutoff  $a$  (Gitterkonstante) und einem Cutoff  $B_{\text{intr}}$  von der Größenordnung der Korrelationslänge  $\xi$ .

Erweitert man die Mean-Field-Theorie zur 1-Loop- $\phi^4$ -Theorie in lokaler Potenzialapproximation (Kapitel 2.3), d. h. nimmt man mehr Fluktuationen mit, so vergrößert sich die Dicke  $w_{\text{intr}}^2$  (Abschnitt 5.2).

- **Kapillarwellen-Theorie** (Kapitel 3): Sie beschreibt die Grenzfläche als schwingende Membran  $h(x, y)$ , deren Fluktuationen ein Profil

$$\phi_{\text{KW}}(z) = \operatorname{erf}\left(\frac{z}{\sqrt{2}s}\right) \quad (6.5)$$

mit der Dicke

$$w_{\text{KW}}^2 = c_{\text{KW}} s^2 = c_{\text{KW}} \frac{1}{2\pi\sigma} \ln \frac{L}{B_{\text{KW}}} \quad (6.6)$$

erzeugen. Dabei werden Kapillarwellen-Fluktuationen

$$\xi \sim B_{\text{KW}} < \lambda < L \quad (6.7)$$

zwischen einem Cutoff  $B_{\text{KW}}$  in der Größenordnung der Korrelationslänge  $\xi$  und der Systemlänge  $L$  berücksichtigt. Der Faktor  $c_{\text{KW}}$  hängt wiederum von der genauen Definition der Dicke ab:

$$c_{\text{KW}} = \begin{cases} \frac{1}{2} & \text{für } p \sim \phi_{\text{KW}}'^2 \\ 1 & \text{für } p \sim \phi_{\text{KW}}' \end{cases} \quad (6.8)$$

Für die Verteilung der Grenzflächenpositionen  $P(h)$  liefert die Kapillarwellentheorie eine Gauß-Verteilung

$$P(h) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}s} e^{-h^2/2s^2} \quad (6.9)$$

mit Varianz

$$\operatorname{var}(h) = s^2 = \frac{1}{2\pi\sigma} \ln \frac{L}{B_{\text{KW}}} \quad (6.10)$$

- **Faltungsnäherung** (Kapitel 4): Hier werden die Beschreibungen aus der Landau-mean-field- und Kapillarwellentheorie kombiniert unter der Annahme, dass Mean-field- und Kapillarwellen-Fluktuationen nicht wechselwirken. Das resultierende Profil

$$c(z) = \phi_g(z) * P(z) \quad (6.11)$$

ist eine Faltung des intrinsischen Profils  $\phi_g$  aus (6.1) mit der Verteilung der Grenzflächenpositionen  $P(h)$  aus (6.9). Die Dicke des Profils ist einfach die Summe aus intrinsischer Dicke und Kapillarwellen-Dicke:

$$\begin{aligned} w^2 &= w_{\text{intr}}^2 + w_{\text{KW}}^2 \\ &= c_{\text{intr}} \xi^2 + \frac{c_{\text{KW}} \ln 2}{2\pi\sigma} \log_2 \frac{L}{B_{\text{KW}}} \\ &= c_{\text{intr}} \xi^2 + A_{\text{KW}} \log_2 \frac{L}{B_{\text{KW}}}, \end{aligned} \quad (6.12)$$

wobei die Additivität im Falle der Definition der Dicke über den Gradienten exakt und im Falle der Definition über das Gradient-Quadrat in guter Näherung gilt (vgl. Abschnitt 5.1).

### Dicken in universeller Form

Die Formel für die Dicken (6.12) lässt sich auf eine temperaturunabhängige Form bringen, wenn man alle Größen in Einheiten der (doppelten) Korrelationslänge  $2\xi$  ausdrückt. Zur Unterscheidung werden Größen in diesen Einheiten mit einem Dach gekennzeichnet. Aus (6.12) ergibt sich unmittelbar

$$\hat{w}^2 = \left( \frac{w}{2\xi} \right)^2 = \frac{c_{\text{intr}}}{4} + \frac{c_{\text{KW}} \ln 2}{8\pi\sigma\xi^2} \log_2 \frac{\hat{L}}{\hat{B}_{\text{KW}}}.$$

Mit der universellen Konstante (Werte der kritischen Amplituden aus (2.11))

$$R = \sigma\xi^2 = f^2\sigma_0 = 0.097(3). \quad (6.13)$$

ergibt sich die universelle Form

$\hat{w}^2 = \frac{c_{\text{intr}}}{4} + \frac{c_{\text{KW}} \ln 2}{8\pi R} \log_2 \frac{\hat{L}}{\hat{B}_{\text{KW}}}$	<span style="font-size: 1.5em;">(6.14)</span>
$= \hat{w}_{\text{intr}}^2 + \hat{A}_{\text{KW}} \log_2 \frac{\hat{L}}{\hat{B}_{\text{KW}}}$	

mit den numerischen Werten:

	$\hat{w}_{\text{intr}}^2 = \frac{c_{\text{intr}}}{4}$	$\hat{A}_{\text{KW}} = \frac{c_{\text{KW}} \ln 2}{8\pi R}$
$p \sim c'^2$	0,322	0,142(4)
$p \sim c'$	0,822	0,284(9)

(6.15)

## 6.2 Ziel und Methode

Bei den im vorangegangenen Abschnitt zusammengefassten Modellen zur Beschreibung von Grenzflächen bleiben folgende Fragen offen:

- **Konzept des intrinsischen Profils.** Die theoretische Beschreibung der Grenzfläche unterscheidet Kapillarwellen- und intrinsisches Regime. Während das Kapillarwellen-Verhalten auf makroskopischer Skala gut beobachtet werden kann, ist dies beim intrinsischen Profil, das historisch in der Grenzflächen-Physik eine dominante Rolle gespielt hat, nicht der Fall. Es ist folglich unklar, ob das Konzept eines solchen Profils überhaupt sinnvoll ist. Insbesondere erscheint es schwierig, das intrinsische und das Kapillarwellen-Verhalten zu trennen.
- **Größe der Cutoffs.** Mean-field- und Kapillarwellentheorie berücksichtigen jeweils nur Fluktuationen bestimmter Größenordnungen. Die dabei verwendeten Cutoffs  $a$  und  $L$  sind unproblematisch, da hier mikroskopische Details uninteressant und die Systemgröße vorgegeben ist. Problematisch sind jedoch die Cutoffs  $B_{\text{intr}}$  und  $B_{\text{KW}}$ , die beide von derselben Größenordnung  $\xi$  sind, über deren genau Größe aber zunächst nichts ausgesagt wird.

In weiteren Verlauf dieser Arbeit wird versucht, die Größen der Cutoffs  $B_{\text{intr}}$  und  $B_{\text{KW}}$ , also den Gültigkeitsbereich von Mean-field- und Kapillarwellentheorie, genauer zu bestimmen. Dazu werden die Vorhersagen der Kapillarwellen- und Mean-field-Theorie sowie der Faltungsnäherung über die Verteilung der Grenzflächenpositionen sowie das Verhalten der Grenzflächen-Dicke getestet. Dabei wird gleichzeitig untersucht, ob intrinsisches Verhalten beobachtbar ist, d. h. ob eine Größenskala existiert, auf der die Vorhersagen der Mean-field-Theorie zutreffen. Nur falls dies der Fall ist, erscheint es sinnvoll, von einem intrinsischen Profil zu sprechen.

Die verschiedenen Theorien zur Beschreibung von Grenzflächen gelten auf verschiedenen Längenskalen, da sie verschiedene Fluktuationen berücksichtigen. Um die Gültigkeit der Theorien zu untersuchen, muss man also verschiedene Fluktuationen trennen. Dies ist schwierig, da reale bzw. simulierte Grenzflächen natürlich *alle* Fluktuationen zeigen.

Die Trennung der Fluktuationen wird über eine **Hoch-** bzw. **Tiefpass-Filterung** erreicht. Das System der Größe  $L \times L \times D$  wird unterteilt in **Blocks** der Größe  $B \times B \times D$ ; dadurch werden alle Fluktuationen  $\lambda < B$  kleiner bzw. alle Fluktuationen  $\lambda > B$  größer als die Blockgröße  $B$  abgeschnitten. Somit können über die Blockgröße  $B$  die zugelassenen Fluktuationen kontrolliert werden. Dabei entscheidet die Betrachtungsweise, ob das Bilden der Blocks als Hoch- oder als Tiefpass wirkt:

- Fasst man jeden der Blocks als eigenes System der Größe  $B \times B \times D$  auf, so ist  $B$  ein Cutoff nach oben, d. h. es werden nur Wellenlängen  $\lambda < B$  zugelassen. Diese Betrachtungsweise wird eingenommen bei Untersuchung der Grenzflächenprofile  $m^B$  und deren Dicken  $w_B^2$  in Abschnitt 9.3 und 9.4. Die Blockgröße  $B$  spielt in diesem Fall die Rolle der Systemgröße  $L$ .
- Mittelt man zuerst über die einzelnen Blöcke und betrachtet dann das gemittelte System der Größe  $\frac{L}{B} \times \frac{L}{B} \times D$ , so werden Fluktuationen mit Wellenlängen  $\lambda < B$  „weggemittelt“. Diese Betrachtungsweise wird eingenommen bei der Untersuchung der Verteilung  $P^B(h)$  der Grenzflächenpositionen in Abschnitt 9.2, wo  $B$  die Rolle des unteren Cutoffs  $B_{\text{KW}}$  der Kapillarwellen-Fluktuationen hat.

Anhand der Formel (6.12) für die Gesamt-Dicke kann man sich dies aufgrund der Additivität in der Faltungsnäherung wie folgt verdeutlichen:

$$\begin{aligned} w^2 &= w_{\text{intr}}^2 + A_{\text{KW}} \log_2 \frac{L}{B_{\text{KW}}} \\ &= \underbrace{w_{\text{intr}}^2 + A_{\text{KW}} \log_2 \frac{B}{B_{\text{KW}}}}_{\text{Dicken } w_B^2 \text{ in Abschnitt 9.4}} + \underbrace{A_{\text{KW}} \log_2 \frac{L}{B}}_{\text{Verteilungen } P^B \text{ in Abschnitt 9.2}} \end{aligned} \quad (6.16)$$

Eine gesonderte Behandlung verlangt die Nullmode, d. h. das **Wandern der Grenzfläche**, vgl. Abb. 6.1. Dieses Wandern tritt stark auf, da die Nullmode aufgrund der Translationsinvarianz keine Energie benötigt. Sowohl die Mean-field- als auch die Kapillarwellentheorie beschreiben aber eine um einen festen Punkt zentrierte Grenzfläche; das Wandern der Grenzfläche würde bei der

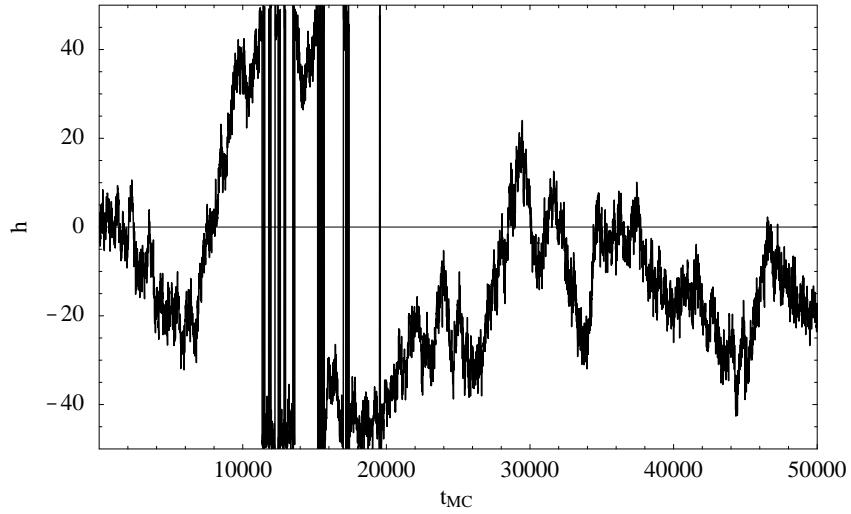


Abb. 6.1: Wandern der (totalen) Grenzflächenposition  $h$  im Laufe der Monte-Carlo-Zeit  $t_{MC}$  bei  $t = -0,01$  und  $D = 100$ .

Mittelwert-Berechnung auch immer zu einem Wegmitteln aller Effekte, d. h. zu Null, führen. Deshalb muss die Nullmode aus dem System herausgenommen werden. Dies geschieht dadurch, dass die Gesamtposition der Grenzfläche stets vor dem Bilden von Mittelwerten in die Mitte des Systems geschoben wird, was einer Beschreibung in einem mit der Grenzfläche mitwandernden System entspricht.

Die Untersuchung der Modelle wird anhand einer Monte-Carlo-Simulation des dreidimensionalen **Ising-Modells** durchgeführt. Da das System-Verhalten in der Nähe des kritischen Punktes universell ist, sind die Ergebnisse gültig für alle Systeme in der **Universalitätsklasse** des dreidimensionalen Ising-Modells, also z. B. auch für die dreidimensionale  $\phi^4$ -Theorie, das dreidimensionale Gemisch von Flüssigkeit und Gas oder von zwei verschiedenen Flüssigkeiten.

# Kapitel 7

## Messverfahren und Messgrößen

Mit einer Monte-Carlo-Simulation werden Boltzmann-verteilte Konfigurationen des dreidimensionalen Ising-Modells auf einem Gitter der Größe  $L \times L \times D$  erzeugt, die auf verschiedenen Größenskalen untersucht werden sollen. Dies geschieht durch Bilden von Blocks verschiedener Größe  $B$ . Das Verfahren basiert auf Ideen aus [We77] und [WSMB99] und ist außerdem der Grundgedanke der Renormierung in der Statistischen Physik.

Im Einzelnen werden folgende Messungen vorgenommen:

1. **Blocking:** Unterteilen des Ising-Gitters in  $(L/B)^2$  Blocks der Größe  $B \times B \times D$ .
2. **Lokale Magnetisierungsprofile:** In jedem Block  $i$  der Größe  $B$  wird ein lokales Magnetisierungsprofil  $m_i^B(z)$  berechnet.
3. **Lokale Grenzflächenposition und -richtung:** Für jedes lokale Magnetisierungsprofil  $m_i^B(z)$  wird eine lokale Grenzflächenposition  $h_i^B$  sowie eine lokale „Grenzflächenrichtung“  $\text{dir}_i^B$  bestimmt.
4. **Verteilung der Grenzflächenpositionen:** Aus den lokalen Grenzflächenpositionen  $h_i^B$  wird die Verteilung  $P^B(h)$  der Grenzflächenpositionen gebildet, und die Momente von  $P^B$  werden geschätzt.
5. **Verschieben der lokalen Magnetisierungsprofile:** Die Profile  $m_i^B(z)$  werden nun so verschoben, dass die Grenzfläche in der Mitte des Systems liegt und die Spins oberhalb der Grenzfläche „up“ zeigen.
6. **Lokale gemittelte Profile:** Die verschobenen Profile einer Blockgröße  $B$  werden gemittelt zu einem lokalen gemittelten Profil  $m^B(z)$ .
7. **Gradientenanalyse:** Mittels einer Gradientenanalyse wird die Grenzflächendicke des lokalen gemittelten Profils  $m^B(z)$  bestimmt.

In den folgenden Abschnitten sollen diese Messschritte genauer erläutert werden. Die gezeigten Bilder stammen dabei aus einer Wolff-Cluster-Monte-

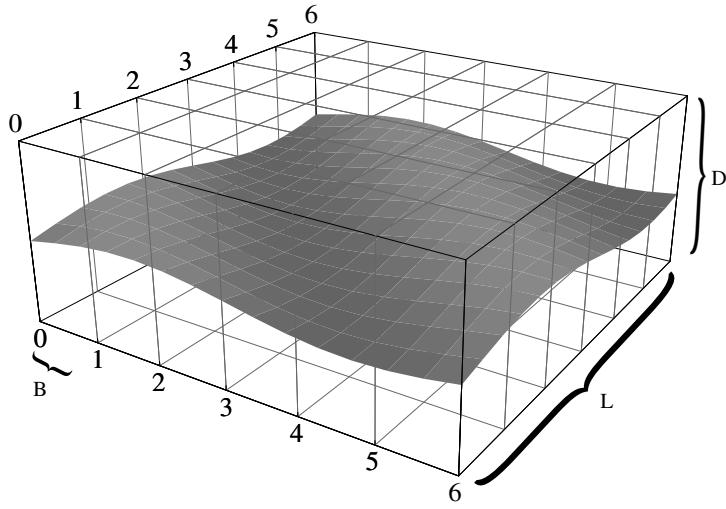


Abb. 7.1: Unterteilen des Ising-Gitters der Größe  $L \times L \times D$  in Blöcke der Größe  $B \times B \times D$ .

Carlo-Simulation eines Ising-Gitters der Größe  $L \times L \times D = 128 \times 128 \times 100$  bei der reduzierten Temperatur  $t = -0,01$ .

## 7.1 Blocking

Um die Grenzfläche auf verschiedenen Größenskalen zu betrachten und die im System vorhandenen Fluktuationen zu kontrollieren, wird das Ising-Gitter der Größe  $L \times L \times D$  unterteilt in  $n_B = (L/B)^2$  Blöcke der Größe  $B \times B \times D$ , vgl. Abb. 7.1. Jeder Block hat die Länge  $B$  in  $x$ - bzw.  $y$ -Richtung und die volle Länge  $D$  in  $z$ -Richtung.

Um in der numerischen Simulation effektiv mit den verschiedenen Blockgrößen rechnen zu können, wird die **Blockgröße**  $B$  iterativ verdoppelt:

$$B = 2^b, \quad b = 0, 1, 2, \dots, n$$

Dabei wird die Gesamtsystemlänge  $L = 2^n$  als Potenz von 2 gewählt. Insgesamt hat man also im System  $n_B = (\frac{L}{B})^2 = 2^{2(n-b)}$  Blöcke.

Zwei Betrachtungsweisen sind nun möglich: Einerseits kann jeder dieser Blöcke als eigenes Ising-System der Größe  $B \times B \times D$  aufgefasst werden, an dem Messungen vorgenommen werden. Andererseits kann man auch zunächst über jeden Block mitteln und das neu erhaltene System der Größe  $\frac{L}{B} \times \frac{L}{B} \times D$  vermessen. Dieses ist aufgrund der vorherigen Mittelung nun kein Ising-System mit Spinwerten  $S = \pm 1$  mehr, sondern nähert sich für größere Blockgrößen  $B$  immer mehr einem System mit kontinuierlichen Werten an.

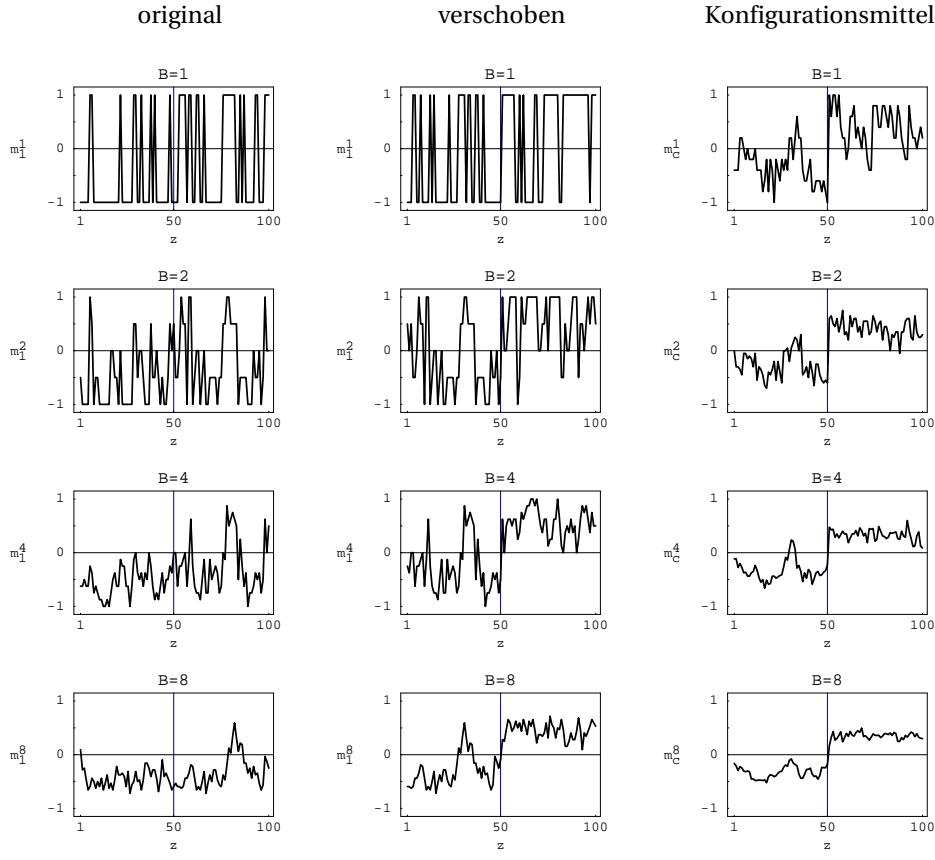


Abb. 7.2: Lokale Magnetisierungsprofile für Blockgrößen  $B=1, 2, 4, 8$ . Links: Lokale Magnetisierungsprofile  $m_i^B$  des ersten Blocks der Blockgröße  $B$ . Mitte: Dieselben Profile  $m_i^B$  wie links, aber verschoben, so dass die Grenzfläche in der Mitte liegt und die Werte rechts davon überwiegend positiv sind. Rechts: Konfigurations-Mittel  $m_c^B$  über alle Profile  $m_i^B$ ,  $i=1, \dots, \frac{L}{B}$  (mit  $m_1^B$  aus der mittleren Spalte).

## 7.2 Lokale Magnetisierungsprofile

Für jeden der Blocks  $i$  ( $i = 1, 2, \dots, \frac{L}{B}$ ) wird ein **lokales Magnetisierungsprofil**  $m_i^B$  in  $z$ -Richtung definiert durch Mittelung über die  $x$ - und  $y$ -Richtung:

$$m_i^B(z) = \frac{1}{B^2} \sum_{x,y \in \text{Block } i} S(x, y, z) \quad (7.1)$$

Dabei bezeichnet  $S(x, y, z)$  den Wert des Spins am Gitterplatz mit den Koordinaten  $(x, y, z)$ . Außer für  $B = 1$  ist  $m_i^B$  nicht ganzzahlig und liegt im Intervall  $[-1, 1]$ .

Plots dieser Profile für den ersten Block  $i=1$  sind in der linken Spalte von Abb. 7.2 und Abb. 7.3 dargestellt. Für  $B=1$  ergibt sich noch kein anschauliches Profil, da nur Werte  $m_1^1 = \pm 1$  möglich sind. Auch eine Grenzfläche (d. h. ein

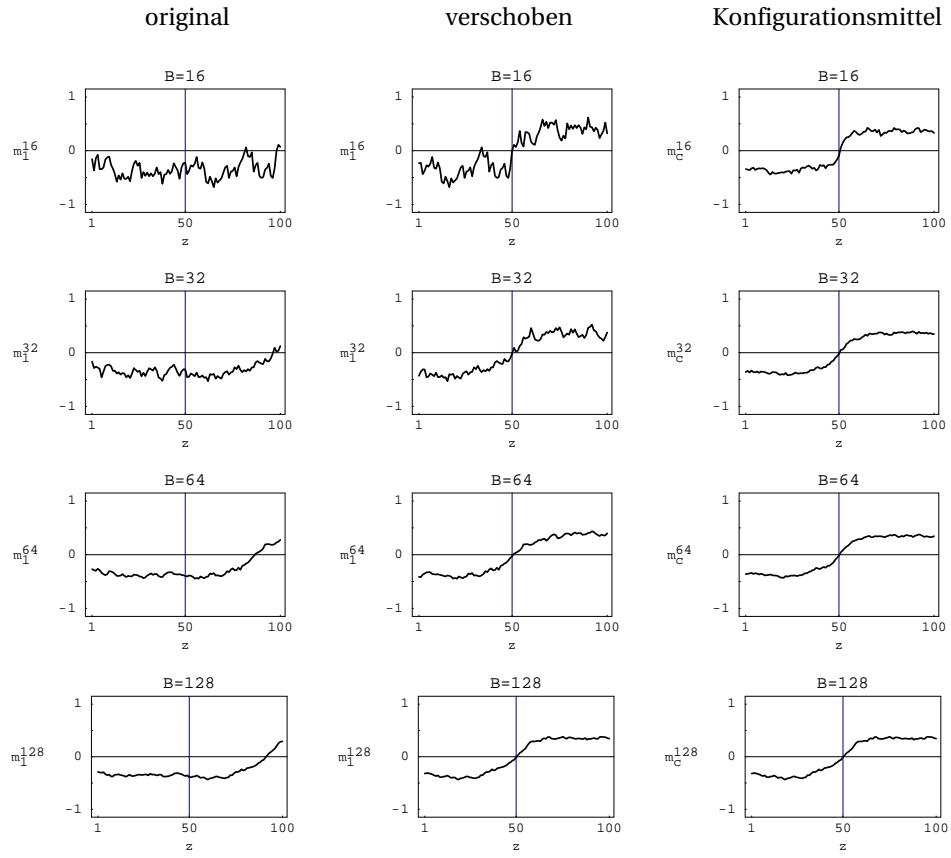


Abb. 7.3: Fortsetzung von Abb. 7.2. Alles wie dort, aber für Blockgrößen  $B=16, 32, 64, 128$ .

Wechsel von „eher negativen“ zu „eher positiven“ Werten) ist nicht erkennbar. Für steigende Blockgrößen  $B$  bilden sich immer glattere Profile heraus, bei denen man schließlich auch sehr gut eine Grenzfläche erkennen kann.

### 7.3 Lokale Grenzflächenposition und -richtung

Die lokalen Magnetisierungsprofile einer Blockgröße sollen nun gemittelt werden zu einem mittleren Magnetisierungsprofil  $m^B$  (wobei sowohl über alle Blöcke einer Konfiguration als auch über alle während der Simulation erzeugten Konfigurationen gemittelt werden soll). Dies kann jedoch nicht einfach durch das Bilden des arithmetischen Mittels geschehen, da die Position der Grenzfläche innerhalb unterschiedlicher Blocks verschieden ist, so dass eine einfache Mittelung Null ergäbe. Vielmehr muss zunächst jedes Profil so geschoben werden, dass sich die Grenzfläche an der gleichen Stelle (aus Symmetriegründen am besten in der Mitte  $z = \frac{D}{2}$  des Systems) befindet. Erst danach ist die Bildung des arithmetischen Mittels sinnvoll.

### Zwischengitterebenen

Zur Definition einer Grenzflächenposition empfiehlt sich die Einführung von Koordinaten  $t$  zwischen den  $z$ -Gitterebenen, die symmetrisch um die Systemmitte  $z = \frac{D}{2} + \frac{1}{2}$  liegen:

$$t = z - \frac{D}{2}$$

gibt die Ebene zwischen den Gitterebenen  $z$  und  $z + 1$  an. Dabei wird die Systemlänge  $D$  stets geradzahlig gewählt, so dass  $t$  die ganzzahligen Werte

$$t = -\frac{D}{2}, -\frac{D}{2} + 1, \dots, -1, 0, 1, \dots, \frac{D}{2} - 1, \frac{D}{2}$$

durchläuft. Zusätzlich wurde der Wert  $t = -\frac{D}{2}$  hinzugefügt, der aufgrund der antiperiodischen Randbedingungen mit  $t = +\frac{D}{2}$  identifiziert wird, wobei Spin-Variablen das Vorzeichen wechseln (Spin-Umklapp).

Für  $D=8$  hat man beispielsweise:

$z =$	1	2	3	4	5	6	7	8	
$z$ -Ebenen:									
$t$ -Ebenen:									
$t =$	-4	-3	-2	-1	0	1	2	3	4

Die Zwischengitterebene  $t = 0$  liegt also in der Mitte des Systems.

### Verschiedene Definitionen der Grenzflächenposition

Gesucht ist nun die **lokale Grenzflächenposition**  $h_i^B$  für jedes lokale Magnetisierungsprofil  $m_i^B$  in  $t$ -Einheiten. In Anbetracht der v. a. für kleine Blockgrößen  $B$  stark fluktuiierenden Profile in Abb. 7.2 (linke Spalte) ist dies keineswegs ein triviales Problem. Übliche Verfahren definieren die Grenzflächenposition

- als Nulldurchgang des Profils (z. B. [HMP96]):

$$m_i^B(h_i^B + \frac{D}{2} - 1) \cdot m_i^B(h_i^B + \frac{D}{2}) \stackrel{!}{<} 0$$

- als Minimum des Profil-Betrages (z. B. [HP92]):

$$|m_i^B(h_i^B + \frac{D}{2})| \stackrel{!}{=} \min\{|m_i^B(z)|, z = 1, \dots, D\}$$

- durch Integration des Profils (verallgemeinert nach [St97]):

$$h_i^B \stackrel{!}{=} \sum_{z=1}^D m_i^B(z) / (2B^2)$$

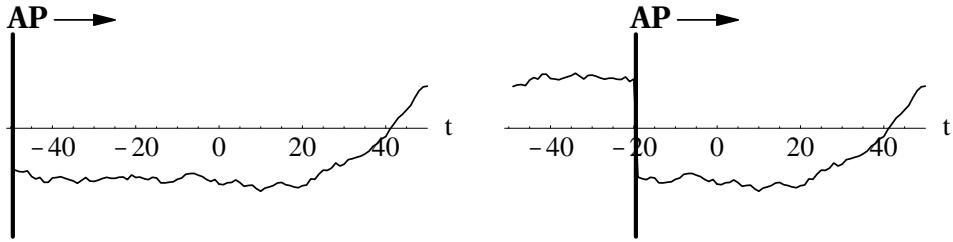


Abb. 7.4: Das Rand-Schiebe-Verfahren am Beispiel des Profils  $m_1^B$  für  $B=L=128$  aus Abb. 7.3, linke Spalte. Links: Ausgangsposition mit  $t_{AP} = -\frac{D}{2} = -50$ . Rechts: Antiperiodische Randbedingungen verschoben nach  $t_{AP} = -20$ .

4. als Erwartungswert einer geeigneten, von  $m_i^B(z)$  abhängigen Gewichtsfunktion  $p_i^B(t)$ :

$$h_i^B \stackrel{!}{=} \langle t \rangle_{p_i^B} = \sum_{t=-\frac{D}{2}+1}^{\frac{D}{2}-1} t p_i^B(t)$$

Alle diese Definitionen funktionieren gut bei glatten Profilen mit wohldefinierter Grenzfläche, stoßen jedoch bei den stark fluktuierenden Profilen für kleinere Blockgrößen  $B$  auf Schwierigkeiten. Bei der vierten Definition erweist sich die Definition einer geeigneten Gewichtsfunktion, die üblicherweise die Ableitung der Profilfunktion enthält, aufgrund der vielen Fluktuationen als wenig sinnvoll. Bei den ersten beiden Definitionen tritt das Problem mehrerer Null-durchgänge des Profils bzw. mehrerer Minima des Profilbetrages auf. Dies hängt jedoch mit dem physikalischen Sachverhalt zusammen, dass solchen Profilen nicht eindeutig eine Grenzfläche zugeordnet werden kann.

Alle obigen Definitionen haben aber insbesondere den gravierenden Nachteil, dass sie nicht **translationsinvariant** sind in dem Sinn, dass die gelieferte Grenzflächenposition verfälscht wird, wenn sich die Grenzfläche nicht ungefähr in der Mitte des Systems bei  $t = 0$  befindet. Ursache sind die Fluktuationen in den homogenen Phasen, deren Effekte sich nur dann „wegmitteln“, wenn gleich viele davon über und unter der Grenzfläche vorhanden sind - wenn die Grenzfläche also in der Mitte des Systems liegt. Letztendlich ist dies ein Resultat des Brechens der Translationsinvarianz in  $z$ -Richtung durch die Endlichkeit des Systems in Verbindung mit den antiperiodischen Randbedingungen in  $z$ -Richtung. Da die Grenzfläche während der Simulation durch das System wandert, ist dies bei der Bestimmung der Grenzflächenposition der lokalen Profile ein Problem.

### Rand-Schiebe-Verfahren

Zur Lösung dieses Problems schlug Münster [Mu03] das translationsinvariante **Rand-Schiebe-Verfahren** vor. Die Translationsinvarianz wird dabei dadurch erreicht, dass die Stelle  $t_{AP}$  der antiperiodischen Randbedingung durch das System „geschoben“ wird. Ursprünglich liegt diese Stelle zwischen  $z = -D$  und

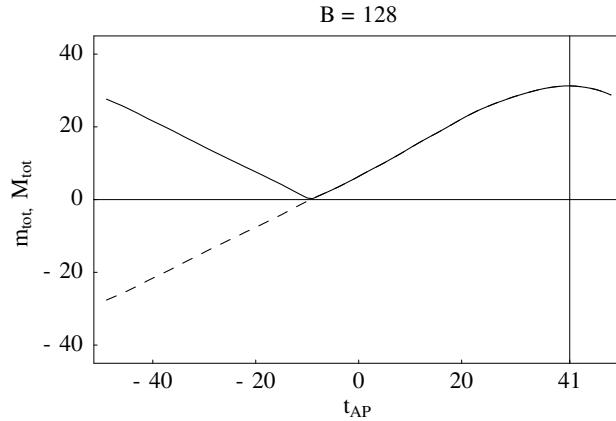


Abb. 7.5: Integral  $m_{\text{tot}}$  (gestrichelt) bzw. dessen Betrag  $M_{\text{tot}}$  (durchgezogen) des Magnetisierungsprofils  $m_1^{128}$  aus Abb. 7.4 in Abhängigkeit von der Stelle  $t_{\text{AP}}$  der antiperiodischen Randbedingungen. Das Maximum von  $M_{\text{tot}}$  wird für  $t_{\text{AP}} = 41$  erreicht.

$z = 1$  bei  $t_{\text{AP}} = -\frac{D}{2}$ . Sie wird nun sukzessive auf alle  $t$ -Ebenen des Systems geschoben, wobei die Profil-Werte, die dabei passiert werden, aufgrund der antiperiodischen Randbedingungen das Vorzeichen wechseln. Dies ist in Abb. 7.4 veranschaulicht. Die Grenzflächenposition wird nun bestimmt durch Betrachtung des Integrals über das Magnetisierungsprofil:

$$m_{\text{tot}} = \sum_{z=1}^D m_i^B(z)$$

Dieses ändert sich natürlich mit der Verschiebung der Stelle der antiperiodischen Randbedingung durch Vorzeichenwechsel des Profils an den von  $t_{\text{AP}}$  passierten Stellen. In Formeln ausgedrückt:

$$m_{\text{tot}}(t_{\text{AP}}) := \sum_{z=1}^D m_i^B(z) - \sum_{z=1}^{t_{\text{AP}} + \frac{D}{2}} 2 \cdot m_i^B(z)$$

Der Betrag

$$M_{\text{tot}}(t_{\text{AP}}) := |m_{\text{tot}}(t_{\text{AP}})|.$$

dieses Integrals nimmt ein Maximum an, wenn maximal viele Profil-Werte dasselbe Vorzeichen haben. Dann aber liegt die Grenzfläche auf dem Rand des Systems (antiperiodische Randbedingungen!). Dies wird im folgenden als Definition der Grenzflächenposition genommen:

$$M_{\text{tot}}(h_i^B) \stackrel{!}{=} \max\{M_{\text{tot}}(t_{\text{AP}}), t_{\text{AP}} = -\frac{D}{2}, \dots, \frac{D}{2} - 1\}$$

Damit ist die Grenzflächenposition  $h_i^B$  eine ganze Zahl zwischen  $-\frac{D}{2}$  und  $\frac{D}{2} - 1$ .

Die Grenzflächenposition wird durch das Maximum von  $M_{\text{tot}}$  bestimmt, da dann die Grenzfläche auf dem Rand liegt und so die Fluktuationen um die

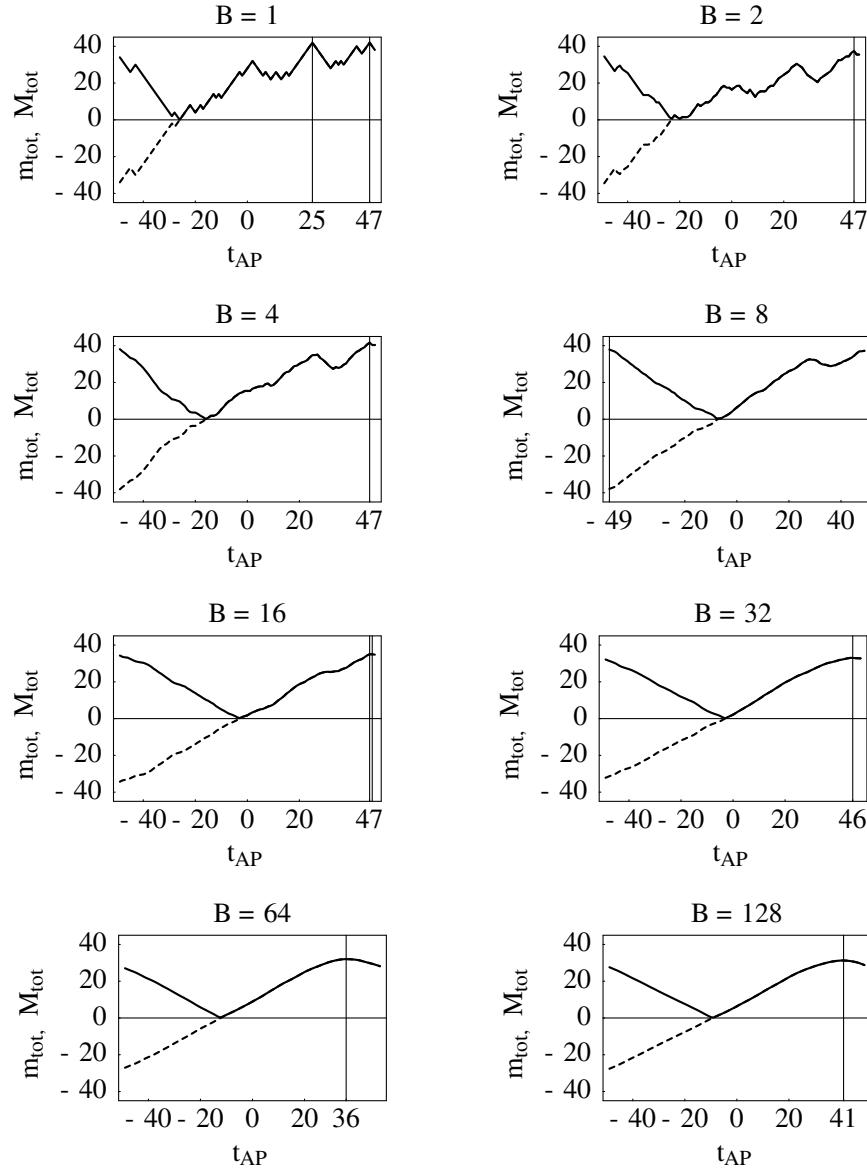


Abb. 7.6: Integral  $m_{\text{tot}}$  (gestrichelt) bzw. dessen Betrag  $M_{\text{tot}}$  (durchgezogen) der Magnetisierungsprofile  $m_1^B$  aus Abb. 7.2 und 7.3 (jeweils linke Spalte) in Abhängigkeit von der Stelle  $t_{\text{AP}}$  der antiperiodischen Randbedingungen. Die Maxima von  $M_{\text{tot}}$  sind durch senkrechte Linien markiert.

Grenzfläche herum beim Verschieben von  $t_{\text{AP}}$  die genaue Lage der Grenzflächenposition bestimmen. Bei Wahl des Minimums von  $M_{\text{tot}}$  hingegen würde die Grenzfläche in der Mitte des Systems liegen, so dass die dann auf dem Rand liegenden Bulk-Fluktuationen die genaue Lage der Grenzfläche festlegen würden. Dies ist offensichtlich physikalisch weniger sinnvoll.

Für das Beispiel-Profil aus Abb. 7.4 ist das Verhalten der beiden Funktionen

$m_{\text{tot}}$  und  $M_{\text{tot}}$  in Abb. 7.5 dargestellt.  $M_{\text{tot}}$  nimmt ein Maximum bei  $t_{\text{AP}} = 41$  an, was der Lage der Grenzfläche in Abb. 7.4 entspricht.

Um zu zeigen, dass das Rand-Schiebe-Verfahren auch bei weniger glatten Profilen gut funktioniert, wird es in Abb. 7.6 auf alle Profile aus der linken Spalte von Abb. 7.2 und 7.3 angewendet. Die Funktion  $M_{\text{tot}}$  verhält sich sogar für die stark fluktuierenden Profile bei kleinen Blockgrößen  $B$  quasi stetig, da von einer Position  $t_{\text{AP}}$  der antiperiodischen Randbedingung zur nächsten nur eine Änderung um  $2 \cdot m_i^B(t_{\text{AP}} + \frac{D}{2})$ , d. h. um maximal  $\pm 2$ , erfolgt. Die Maxima sind bis auf für  $B=1$  und für  $B=16$  eindeutig; bei  $B=16$  liegen die zwei Maxima dicht nebeneinander, bei  $B=1$  jedoch weit auseinander. Dies korrespondiert der physikalischen Tatsache, dass man dem stark fluktuierenden Profil für  $B=1$  kaum eine eindeutige Grenzflächenposition zuordnen kann. In solchen Fällen, in denen **entartete Maxima** auftreten, wird als Grenzflächenposition zufällig eine der Maximums-Stellen ausgewählt. Dies vermeidet eine künstlich produzierte Asymmetrie der Verteilungen  $P(h)$  ( $\sim$  Anzahl der während der Simulation aufgetretenen Grenzflächenpositionen bei  $h$ ), die ansonsten symmetrisch zu Null sind.

### Entartung der Grenzflächenposition

Die Häufigkeit  $N$  von  $n_{\text{max}}$  Entartungen ist für verschiedene Blockgrößen  $B$  in Abb. 7.7 logarithmisch aufgetragen. Am häufigsten ist  $n_{\text{max}}=1$ ; meistens konnte die Grenzfläche also eindeutig bestimmt werden. Wie erwartet treten bei kleineren Blockgrößen mehr Entartungen auf als bei größeren. Insgesamt fällt die Anzahl der Entartungen exponentiell ab. Dies lässt sich erklären, wenn man jedes Maximum von  $M_{\text{tot}}$  mit dem Vorhandensein einer Grenzfläche identifiziert ( $n_{\text{max}} = 4$  entspricht dann 4 Grenzflächen im System). Die Wahrscheinlichkeit des Auftretens einer Grenzfläche ist der Boltzmann-Faktor

$$P(1 \text{ Grenzfläche}) \sim e^{-\beta E_{GF}},$$

wobei  $E_{GF}$  die Energie ist, die zur Bildung einer Grenzfläche notwendig ist. Vernachlässigt man die Wechselwirkung zwischen mehreren Grenzflächen, so ist die Wahrscheinlichkeit für  $n_{\text{max}}$  Grenzflächen einfach das Produkt

$$P(n_{\text{max}} \text{ Grenzflächen}) \sim e^{-\beta E_{GF}} \cdot e^{-\beta E_{GF}} \cdot \dots \cdot e^{-\beta E_{GF}} = e^{-\beta n_{\text{max}} E_{GF}},$$

das tatsächlich exponentiell mit  $n_{\text{max}}$  abfällt.

Die mittlere Entartung  $\langle n_{\text{max}} \rangle$  bzw. der Anteil  $N_{>1} : N_{\text{ges}}$  der entarteten Grenzflächenpositionen an allen Grenzflächenpositionen ist bei kleinen Blockgrößen  $B$  noch recht groß, nähert sich aber für große Blockgrößen  $B$  den idealen Werten 1 bzw. 0 an, vgl. Abb. 7.8, was für die Güte des Rand-Schiebe-Verfahrens spricht.

Dass die Entartung für  $B=1$  geringer ist als für  $B=2$  (was man sowohl in Abb. 7.7 als auch in Abb. 7.8 erkennt), ist letztendlich eine Folge davon, dass für  $B=1$  das Grenzflächenprofil nur die Werte  $\pm 1$  annehmen kann.

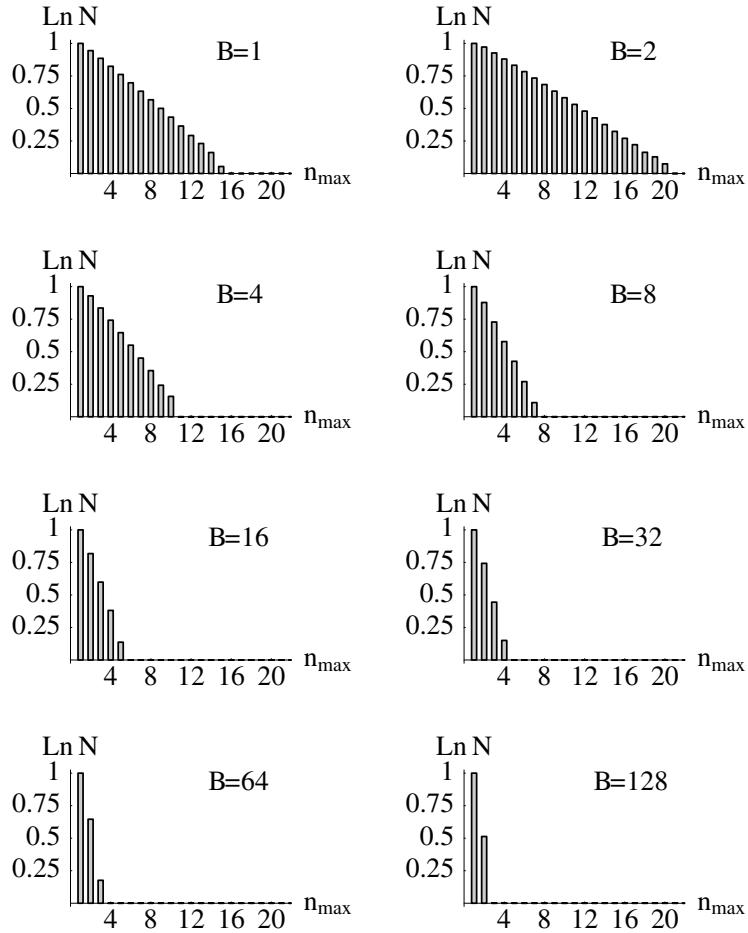


Abb. 7.7: Häufigkeit  $N$  der Entartung  $n_{\text{max}}$  der Grenzflächenposition im Rand-Schiebe-Verfahren für verschiedene Blockgrößen  $B$ . Die Häufigkeit ist logarithmisch aufgetragen und so normiert, dass  $\ln N(n_{\text{max}} = 1) = 1$ .

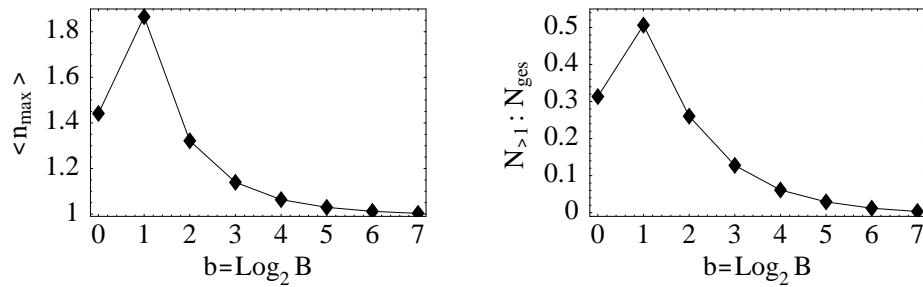


Abb. 7.8: Links: Mittlere Entartung  $\langle n_{\text{max}} \rangle$  der Grenzflächenposition im Rand-Schiebe-Verfahren für verschiedene logarithmierte Blockgrößen  $b = \log_2 B$ . Rechts: Anteil  $N_{>1}$  der entarteten Grenzflächenpositionen an der Anzahl aller Grenzflächenpositionen  $N_{\text{ges}}$ .

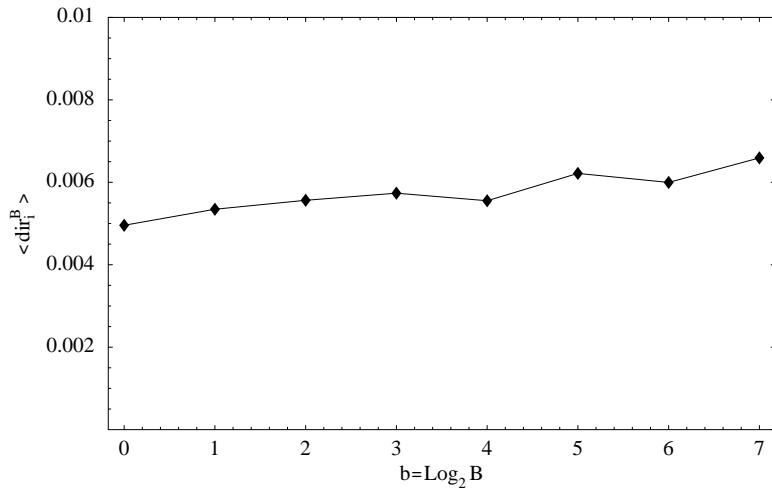


Abb. 7.9: Mittlere Grenzflächenrichtung  $\langle \text{dir}_i^B \rangle$  für verschiedene logarithmierte Blockgrößen  $b = \text{Log}_2 B$ .

### Grenzflächenrichtung

Nachdem nun die lokale Grenzflächenposition  $h_i^B$  bestimmt ist, kann die Grenzfläche in die Mitte geschoben werden. Bei einer Mittelung ergibt sich aber immer noch das Problem, dass die Grenzflächen zwar nun an der gleichen Stelle liegen, die Grenzflächen in verschiedenen Blocks aber immer noch verschiedene „Richtungen“ haben, d. h. das Profil oberhalb der Grenzfläche hat mal eher positives, mal eher negatives Vorzeichen, so dass sich im Mittel Null ergeben würde.

Deshalb wird eine „**Grenzflächenrichtung**“ definiert als Vorzeichen des Integrals des Magnetisierungsprofils, wenn die Grenzfläche auf dem Rand liegt:

$$\text{dir}_i^B \stackrel{!}{=} \text{sign} (m_{\text{tot}}(h_i^B))$$

Es ist  $\text{dir}_i^B = +1$ , wenn das Profil oberhalb der Grenzfläche überwiegend positiv,  $\text{dir}_i^B = -1$ , wenn das Profil oberhalb der Grenzfläche überwiegend negativ ist. Die (Monte-Carlo-)gemittelte Grenzflächenrichtung  $\langle \text{dir}_i^B \rangle$  liegt sehr nahe bei Null; wie aus Symmetriegründen notwendig treten beide Grenzflächenrichtungen  $\text{dir}_i^B = \pm 1$  gleich häufig auf, s. Abb. 7.9.

## 7.4 Verteilung der Grenzflächenpositionen

Aus den lokalen Grenzflächenpositionen  $h_i^B$  erhält man die Häufigkeitsverteilung der Grenzflächenpositionen bei der Blockgröße  $B$ , zunächst für eine Konfiguration:

$$P_c^B(h) = \#\{h_i^B | h_i^B - h_1^{B=L} = h\} / \#\{h_i^B\}$$

für  $h = -\frac{D}{2} + 1, \dots, \frac{D}{2} - 1$ . Dabei werden die Grenzflächenpositionen relativ zur Gesamtposition der Grenzfläche  $h_1^{B=L}$  gemessen, womit das Wandern der Grenzfläche herausgenommen wird. Das Monte-Carlo-Mittel liefert dann die Wahr-

scheinlichkeit des Auftretens der Grenzflächenposition  $h$  während der Simulation:

$$P^B(h) = \langle P_c^B(h) \rangle \quad (7.2)$$

Da die Anzahl der Grenzflächenpositionen einer Konfiguration bei gegebener Blockgröße immer gleich ist, kann  $P^B$  auch berechnet werden über:

$$P^B(h) = \#\{h_i^B \text{ in allen MC-Konf.} | h_i^B - h_1^L = h\} / \#\{h_i^B \text{ in allen MC-Konf.}\},$$

wobei natürlich die Messung relativ zur Gesamt-Grenzflächenposition immer innerhalb derselben Konfiguration erfolgt.

Nach der Kapillarwellen-Theorie sollten die Grenzflächenpositionen  $h$  für eine Blockgröße  $B$  Gauß-verteilt sein:  $P^B(h) \sim \mathcal{N}(0, s^2)$ . Um dies zu testen, werden die Momente von  $P^B$  untersucht.

### Schätzen der Momente

Da die Messungen im Abstand größer als zwei integrierte Korrelationszeiten vorgenommen werden (s. Abschnitt 8.2), sind sie stochastisch unabhängig, und man kann die üblichen Schätzer für die Momente verwenden:

$$\begin{aligned} \text{Mittelwert : } \text{mean}(h) &= \sum_h P^B(h) h \\ \text{Varianz : } \text{var}(h) &= \sum_h P^B(h) (h - \text{mean}(h))^2 \\ \text{Skewness : } \text{skew}(h) &= \sum_h P^B(h) \left( \frac{h - \text{mean}(h)}{\sqrt{\text{var}(h)}} \right)^3 \\ \text{Kurtosis : } \text{kurt}(h) &= \sum_h P^B(h) \left( \frac{h - \text{mean}(h)}{\sqrt{\text{var}(h)}} \right)^4 - 3 \end{aligned} \quad (7.3)$$

Eine Gauß-Verteilung ist eine kontinuierliche Verteilung; die Momente werden aber aus einer diskreten Verteilung  $P^B(h)$ ,  $h = -\frac{D}{2} + 1, \dots, \frac{D}{2} - 1$ , mit Klassenintervallen der Länge  $\Delta h = 1$  bestimmt. Nimmt man in jeder Klasse eine Rechteck-Verteilung an, so entsteht durch das Einteilen in Klassen eine zusätzliche Varianz von  $\frac{(\Delta h)^2}{12} = \frac{1}{12}$ , weshalb man beim Schätzen der Varianz aus den diskreten Daten  $P^B(h)$  die **Sheppard-Korrektur** anfügt [Co71]:

$$\text{var}(h) = \sum_h P^B(h) (h - \text{mean}(h))^2 - \frac{1}{12} \quad (7.4)$$

Für die Momente einer Gauß-Verteilung  $\mathcal{N}(0, s^2)$  gilt:

$$\begin{aligned} \text{Mittelwert : } \text{mean}(h) &= 0 \\ \text{Varianz : } \text{var}(h) &= s^2 \\ \text{Skewness : } \text{skew}(h) &= 0 \\ \text{Kurtosis : } \text{kurt}(h) &= 0 \end{aligned}$$

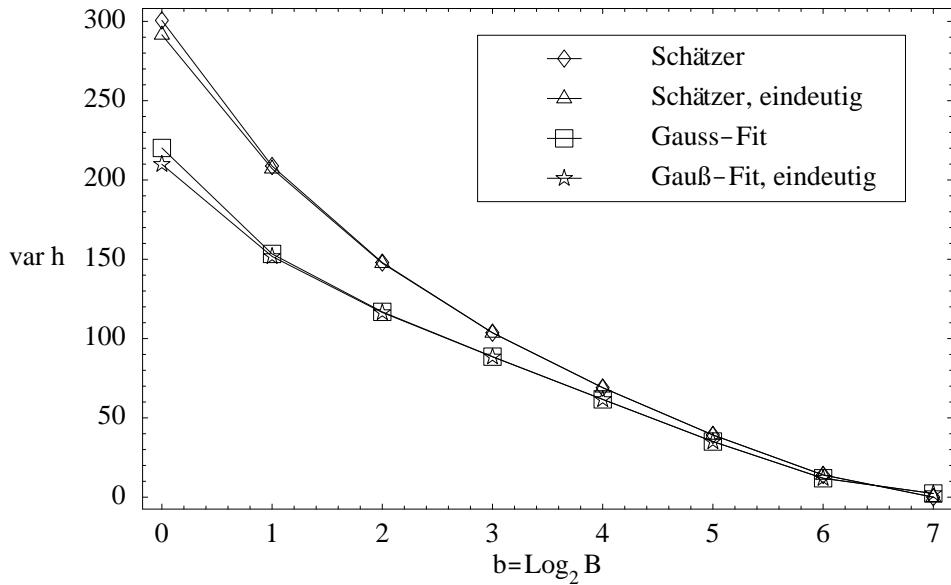


Abb. 7.10: Nach verschiedenen Methoden gemessene Varianzen der Verteilung  $P^B$  der Grenzflächenpositionen für verschiedene Blockgrößen  $B$ . „Schätzer“: Varianz bestimmt nach (7.4). „Gauß-Fit“: Varianz bestimmt aus einem Gauß-Fit an die Verteilung  $P^B$ . „Schätzer, eindeutig“ bzw. „Gauß-Fit, eindeutig“: ebenso, aber bestimmt aus der Verteilung  $P_{\text{eind}}^B$  der eindeutig bestimmten Grenzflächenpositionen.

### Varianz aus der Gauß-Verteilung

Die Varianz der Verteilung  $P^B$  ist von besonderer Bedeutung, da sie die Kapillarwellen-Dicke der Grenzfläche angibt und mit dem Logarithmus der Systemgröße skalieren sollte. Dabei wird von der Kapillarwellen-Theorie eine Gauß-Verteilung *vorausgesetzt*. Deshalb wird zusätzlich die Varianz bestimmt als Fit-Parameter  $b$  eines Least-Square-Fits der gemessenen Verteilung  $P^B(h)$  mit einer Gauß-Verteilung

$$\frac{1}{\sqrt{2\pi b}} e^{-(h-a)^2/2b}. \quad (7.5)$$

Diese Varianz ist die Varianz des *Gaußschen* Anteils der Verteilung  $P^B$  und entspricht damit eher der Kapillarwellen-Varianz als die in (7.4) geschätzte Varianz.

### Einfluss der Entartung

Die lokalen Grenzflächenpositionen für die Verteilungen  $P^B(h)$  werden nach dem Rand-Schiebe-Verfahren aus Abschnitt 7.3 bestimmt. Dabei kann in einigen Fällen die Position nicht eindeutig bestimmt werden, sondern ist „entartet“, woraufhin eine der möglichen Grenzflächenpositionen *zufällig* ausgewählt

wird. Es erscheint möglich, dass dadurch die Verteilung der Grenzflächenpositionen  $P^B$  verfälscht wird, dass sie z.B. durch zufällige Wahl weit von der Gesamt-Grenzflächenposition entfernt lokaler Grenzflächenpositionen eine zu große Varianz erhält. Deshalb wurde zusätzlich zur Verteilung  $P^B$  aller gemessenen Grenzflächenpositionen auch die Verteilung  $P_{\text{eind}}^B$  der *eindeutig* bestimmten Grenzflächenpositionen betrachtet:

$$P_{\text{eind}}^B = \#\{h_i^B | h_i^B - h_1^L = h \text{ eindeutig}\} / \#\{h_i^B | h_i^B \text{ eindeutig}\},$$

wobei wieder die lokalen Grenzflächenpositionen  $h_i^B$  aus *allen* Monte-Carlo-Konfigurationen genommen werden.

Die mit dem Schätzer (7.4) bzw. mit dem Gauß-Fit (7.5) bestimmten Varianzen aus den Verteilungen  $P^B$  bzw.  $P_{\text{eind}}^B$  sind in Abb. 7.10 dargestellt. Eine Vergrößerung der Varianz durch entartete Grenzflächenpositionen ist lediglich für kleine Blockgrößen  $B=1$  sichtbar; für größere Blockgrößen stimmen die Werte aus den eindeutigen und aus allen Grenzflächenpositionen überein, weshalb im Folgenden nur noch die Verteilung  $P^B$  betrachtet wird. Zwischen den auf verschiedene Art bestimmten Varianzen (Schätzer bzw. Gauß-Fit) zeigen sich erhebliche Differenzen, die erst für große Blockgrößen  $B$  zu verschwinden beginnen.

Die Ergebnisse für die Momente von  $P^B(h)$ , insbesondere für die Varianzen, werden ausführlich in Kapitel 9 diskutiert.

## 7.5 Verschieben der lokalen Magnetisierungsprofile

Mit den lokalen Grenzflächenpositionen  $h_i^B$  und -richtungen  $\text{dir}_i^B$  aus Abschnitt 7.3 können die lokalen Magnetisierungsprofile  $m_i^B$  so geschoben werden, dass die Grenzfläche in der Mitte (bei  $t = 0$ , d.h. zwischen  $z = \frac{D}{2}$  und  $z = \frac{D}{2} + 1$ ) liegt und das Vorzeichen des Profils oberhalb der Grenzfläche überwiegend positiv ( $\text{dir}_i^B = 1$ ) ist:

$$m_i^B(z)|_{\text{verschoben}} = \text{dir}_i^B \cdot \epsilon_i^B(z) \cdot m_i^B((z - h_i^B) \bmod D)$$

Dabei berücksichtigt  $\epsilon_i^B(z) \in \{\pm 1\}$  den Vorzeichenwechsel, falls  $m_i^B(z)$  beim Verschieben den Rand mit den antiperiodischen Randbedingungen passiert, d.h.

$$\epsilon_i^B(z) = \begin{cases} +1 & \text{falls } z - h_i^B \in [1, D] \\ -1 & \text{falls } z - h_i^B \notin [1, D]. \end{cases}$$

Der eventuelle Gesamt-Vorzeichenwechsel durch  $\text{dir}_i^B \in \{\pm 1\}$  sorgt dafür, dass das Profil oberhalb der Grenzfläche überwiegend positiv ist.

Das Ergebnis dieses Verfahrens zeigen Abb. 7.2 und 7.3, wo in der mittleren Spalte die zu den Profilen der linken Spalte gehörenden verschobenen Profile abgebildet sind. Die verschobenen Profile haben eine Grenzfläche in der Mitte zwischen  $z = \frac{D}{2} = 50$  und  $z = \frac{D}{2} + 1 = 51$  (oder zumindest einen Nulldurchgang, falls man eine Grenzfläche nicht erkennen kann), und haben für  $z > \frac{D}{2} + 1 = 51$  eher positive Werte.

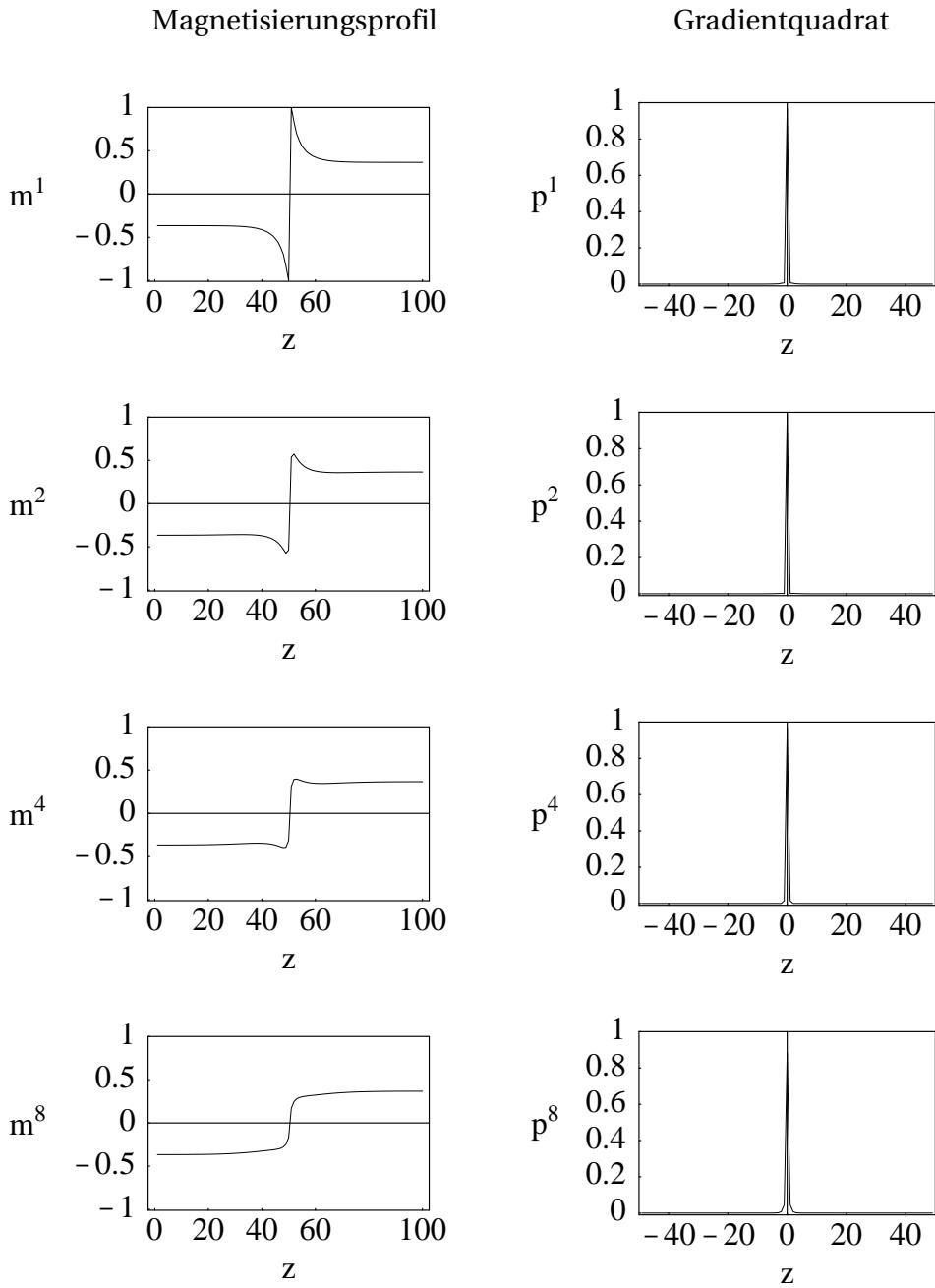


Abb. 7.11: Lokale Grenzflächenprofile  $m^B$  (links) sowie ihre normierten Gradienten-Quadrate  $p^B$  (rechts) für Blockgrößen  $B = 1, 2, 4, 8$ .

## 7.6 Lokale gemittelte Profile

Die verschobenen Profile können nun zu einem Profil einer (Monte-Carlo-) Konfiguration gemittelt werden:

$$m_c^B(z) = \frac{1}{n_B} \sum_{i=1}^{n_B} m_i^B(z)|_{\text{verschoben}},$$

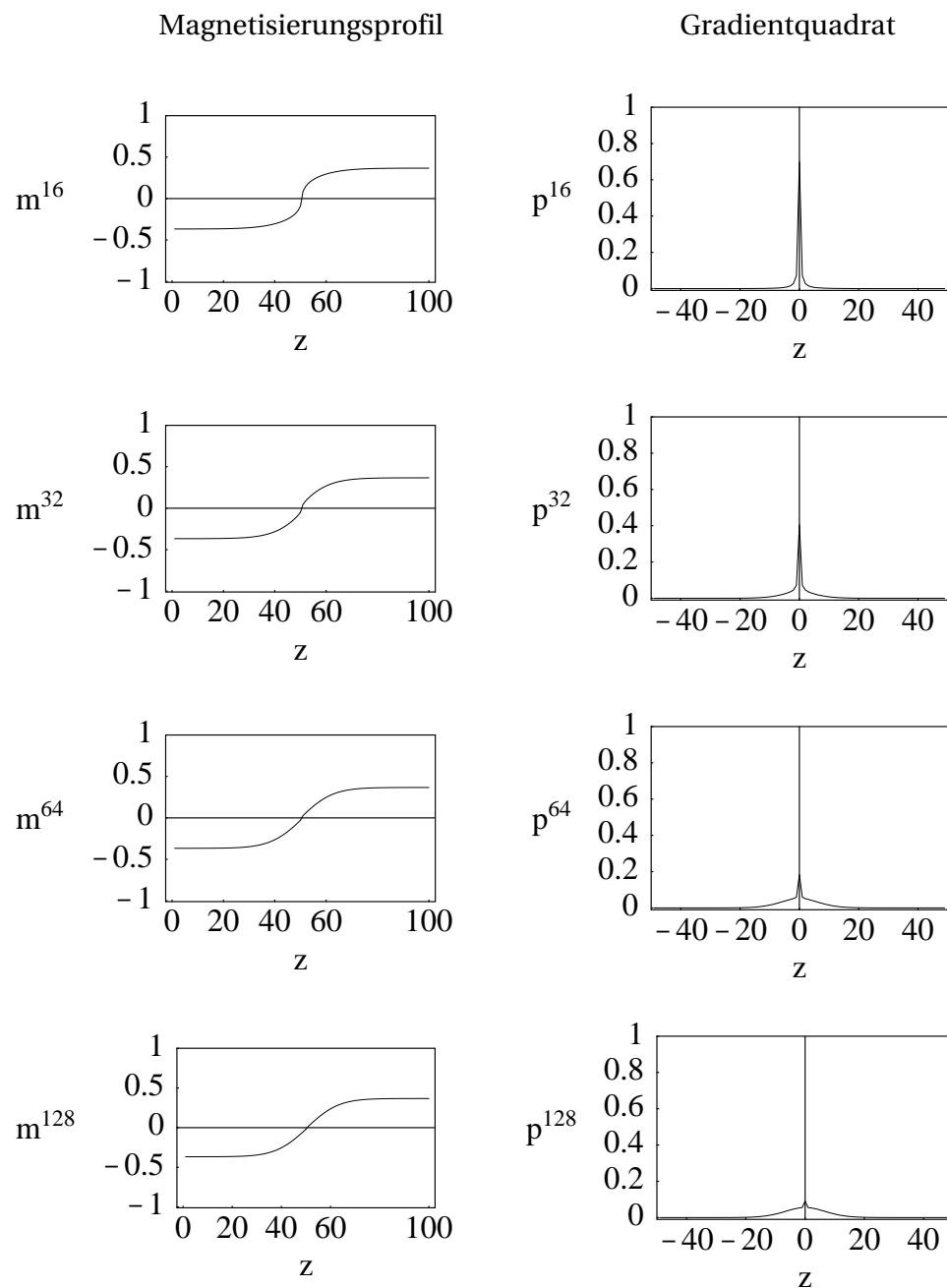


Abb. 7.12: Lokale Grenzflächenprofile  $m^B$  (links) sowie ihre normierten Gradienten-Quadrat  $p^B$  (rechts) für Blockgrößen  $B = 16, 32, 64, 128$ .

wobei  $n_B = \left(\frac{L}{B}\right)^2$  die Anzahl der Blocks der Größe B ist. Diese Profile sind in der rechten Spalte von Abb. 7.2 und Abb. 7.3 abgebildet. Für größere Blockgrößen werden die Profile glatter und breiter. Diese Profile sind aber nur interessant zur Bestimmung der Autokorrelationszeiten (vgl. Abschnitt 8.2). Eigentlich interessant sind die Monte-Carlo-gemittelten Profile

$$m^B(z) = \langle m_c^B(z) \rangle,$$

die in Abb. 7.11 und 7.12 (jeweils linke Spalte) dargestellt sind. Es sind sehr schöne glatte Profile, die für größere Blockgrößen immer breiter und tanh- bzw. erf-ähnlicher werden. Sie geben das **Profil auf der Größenskala B** an.

Der unphysikalische „Haken“ für kleine Blockgrößen  $B=1, 2, 3$  röhrt von der Konstruktion des Profils her: Die Grenzflächenposition wird mittels des Rand-Schiebe-Verfahrens so bestimmt, dass sie immer an einem Nulldurchgang des Profils liegt. Für Profile mit Werten  $\pm 1$  wie diejenigen für  $B=1$  bedeutet dies, dass die Grenzfläche immer bei einem Sprung von  $-1$  auf  $+1$  (bzw. andersherum, was aber durch die Berücksichtigung der Grenzflächenrichtung vor dem Mitteln herumgedreht wird) liegt, so dass für alle  $i$  gilt:

$$m_i^B\left(\frac{D}{2}\right)|_{\text{verschoben}} = -1 \quad \text{bzw.} \quad m_i^B\left(\frac{D}{2} + 1\right)|_{\text{verschoben}} = +1$$

Dies gilt dann natürlich auch für das mittlere Profil  $m^B$ . Diese Gitterartefakte, die letztendlich daher röhren, dass man stark fluktuierenden Profilen eine Grenzfläche zuordnet, obwohl sie keine eindeutige Grenzfläche haben, verschwinden für größere Blockgrößen B.

## 7.7 Gradientenanalyse

Für das lokale gemittelte Profil  $m^B$  kann nun die Dicke der Grenzfläche bestimmt werden über eine Gradientenanalyse wie in Abschnitt 5.1.2. Dies ist sogar für kleine Blockgrößen sinnvoll, da durch das Mitteln genügend glatte Profile entstanden sind, um sinnvoll einen Gradienten definieren zu können. Es werden zwei Definitionen der Grenzflächen-Dicke betrachtet: einmal nach Definition 2c) über das normierte Gradient-Quadrat und zum anderen nach Definition 2a) über den normierten Gradienten, um das Ergebnis vergleichen und so die Abhängigkeit der Resultate von der Definition der Dicke untersuchen zu können.

Das **normierte Gradient-Quadrat** des Profils  $m^B(z)$ ,  $z = 1, \dots, D$  wird sinnvollerweise auf den  $t$ -Ebenen zwischen den  $z$ -Gitterebenen definiert:

$$p^B(t) := \frac{1}{N} \left[ m^B(t + \frac{D}{2} + 1) - m^B(t + \frac{D}{2}) \right]^2$$

mit  $t = -\frac{D}{2} + 1, \dots, 0, \dots, \frac{D}{2} - 1$  und dem Normierungsfaktor

$$N = \sum_{t=-\frac{D}{2}+1}^{\frac{D}{2}-1} \left[ m^B(t + \frac{D}{2} + 1) - m^B(t + \frac{D}{2}) \right]^2,$$

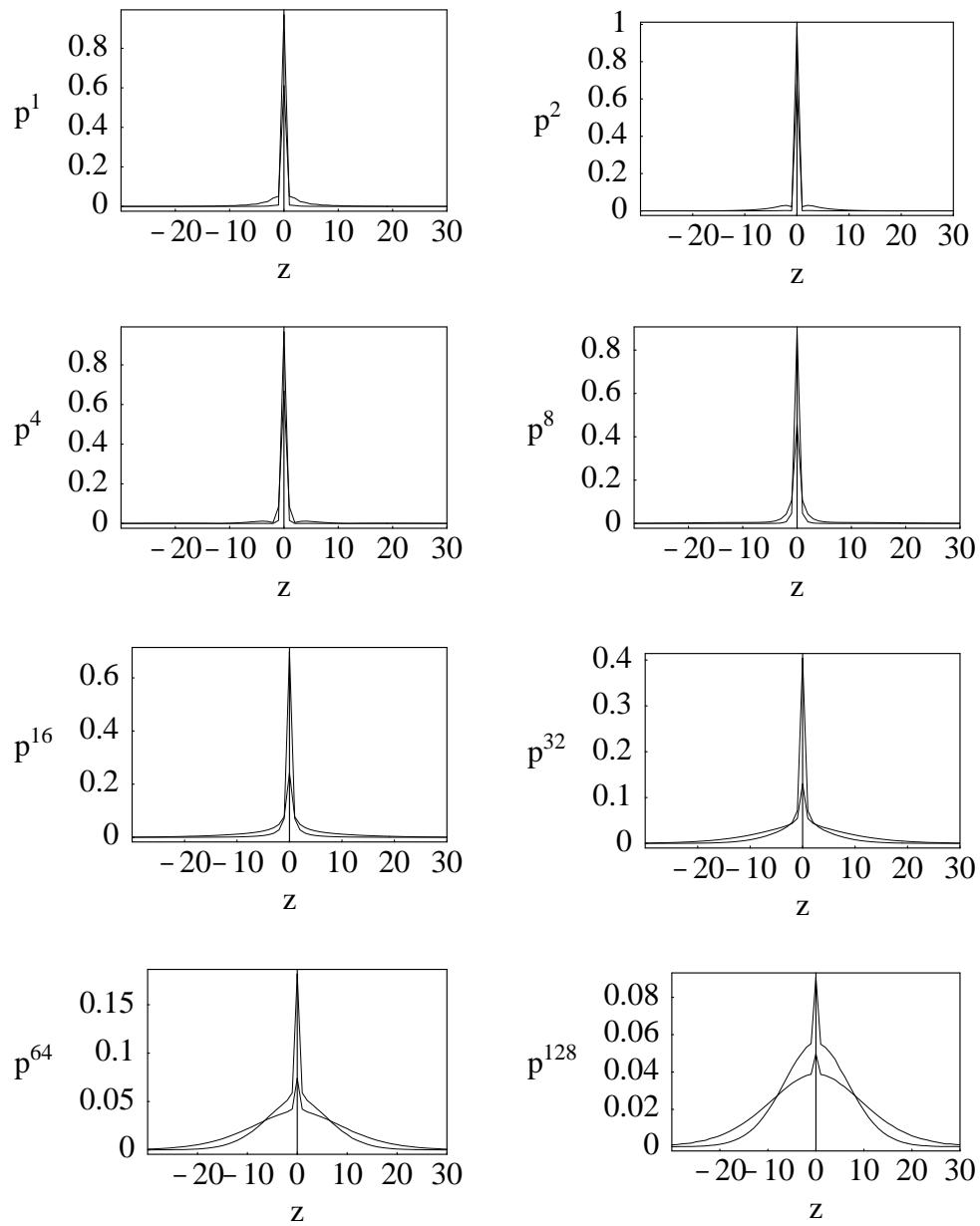


Abb. 7.13: Gewichtsfunktionen  $p^B$  zur Definition der Grenzflächendicke für Blockgrößen  $B=1, 2, 4, 8, 16, 32, 64$  und  $128$ . Die spitzere Funktion mit größeren Werten bei  $t = 0$  ist jeweils das normierte Gradient-Quadrat, die Funktion mit den weiteren Ausläufern nach außen jeweils der normierte Gradient-Betrag.

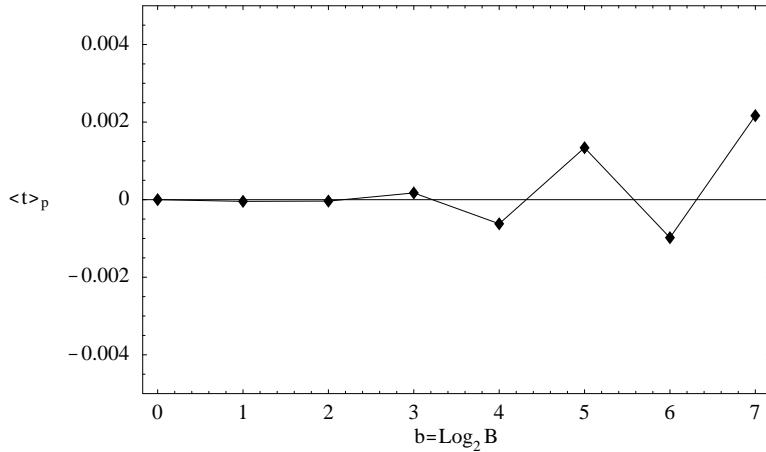


Abb. 7.14: Grenzflächenposition  $\langle t \rangle_p$  aus der Gradientenanalyse für logarithmierte Blockgrößen  $b = \log_2 B$ .

der dafür sorgt, dass  $\sum_{t=-\frac{D}{2}+1}^{\frac{D}{2}-1} p^B(t) = 1$  ist.

Die normierten Gradient-Quadrate  $p^B$  sind in Abb. 7.11 und 7.12 rechts neben den jeweiligen Profilen  $m^B$  dargestellt. Sie haben einen Peak um die Grenzflächenposition  $t=0$ , der für größere Blockgrößen weniger scharf wird. Dies zeigt die Eignung von  $p^B$  als Gewichtsfunktion zur Definition der Grenzflächendicke.

Analog definiert man den **normierten Gradienten**

$$p^B(t) := \frac{1}{N} |m^B(t + \frac{D}{2} + 1) - m^B(t + \frac{D}{2})|$$

auf den Zwischengitterebenen  $t = -\frac{D}{2} + 1, \dots, 0, \dots, \frac{D}{2} - 1$  mit dem Normierungsfaktor

$$N = \sum_{t=-\frac{D}{2}+1}^{\frac{D}{2}-1} |m^B(t + \frac{D}{2} + 1) - m^B(t + \frac{D}{2})|.$$

Dabei wurden um die Ableitung zusätzlich Betragsstriche gesetzt, da die Monte-Carlo-Profilen für kleine Blockgrößen  $B$  (im Gegensatz zu den theoretischen Profilen) nicht monoton wachsend sind, eine Gewichtsfunktion mit negativen Werten aber nicht sinnvoll ist.

Ein Vergleich der beiden Gewichtsfunktionen ist in Abb. 7.13 dargestellt. Für kleine Blockgrößen  $B$  unterscheiden sich die beiden Funktionen kaum; sie sind beide extrem scharf um Null konzentriert. Für größere Blockgrößen  $B$  ist, wie zu erwarten, das Gradient-Quadrat wesentlich schärfer um Null konzentriert als der Gradient selbst. Beide Gewichtsfunktionen haben auch bei diesen großen Blockgrößen immer noch einen unphysikalischen Extra-Peak (verglichen mit einer theoretischen Gewichtsfunktion, die aus einem tanh-Profil entsteht) bei  $t = 0$ , der von der Diskretheit des Gitters herröhrt. Er ist beim Gradient-Quadrat naturgemäß stärker ausgeprägt als beim Gradienten.

Das erste Moment der Gewichtsfunktion  $p^B$  (ob Gradient-Quadrat oder Gradient-Betrag)

$$\langle t \rangle_p = \sum_{t=-\frac{D}{2}+1}^{\frac{D}{2}-1} t p^B(t)$$

gibt die Grenzflächenposition an. Nach Konstruktion sollte diese nahe bei Null liegen, was auch der Fall ist, siehe Abb. 7.14.

Das zweite Moment der Gewichtsfunktion  $p^B$  liefert das Quadrat der Grenzflächendicke:

$$w_B^2 = \langle t^2 \rangle_p - \langle t \rangle_p^2 = \sum_{t=-\frac{D}{2}+1}^{\frac{D}{2}-1} t^2 p^B(t) - \langle t \rangle_p^2$$

Die Ergebnisse für die Grenzflächendicke werden ausführlich im Kapitel 9 diskutiert.

# Kapitel 8

## Simulation und Auswertung

In diesem Kapitel werden kurz der verwendete Monte-Carlo-Algorithmus und einige Details der Auswertung präsentiert.

### 8.1 Wolff-Algorithmus

#### Monte-Carlo-Simulation und kritische Phänomene

Das Ziel einer Monte-Carlo-Simulation ist die numerische Berechnung eines statistischen Mittelwerts. Zu diesem Zweck wird eine Reihe von System-Konfigurationen  $\phi_{-\tau_{\text{eq}}+1}, \phi_{-\tau_{\text{eq}}+2}, \dots, \phi_{-1}, \phi_0, \phi_1, \phi_2, \dots, \phi_n$  erzeugt, die nach einer **Equilibrierungszeit**  $\tau_{\text{eq}}$  Boltzmann-verteilt sind, so dass man den mit der Boltzmann-Verteilung  $P_E = \exp(-\beta S)$  gewichteten statistischen Mittelwert approximieren kann durch das arithmetische Monte-Carlo-Mittel:

$$\langle f \rangle = \int \mathcal{D}\phi P_E[\phi] f[\phi] \approx \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n f[\phi_i] \quad (8.1)$$

Eine geeignete Kette von Zuständen ist eine stationäre Markov-Kette, die ergodisch ist und als Grenz-Verteilung die Boltzmann-Verteilung hat. Diese erzeugt man über die Vorgabe geeigneter Übergangswahrscheinlichkeiten  $P(\phi_i \rightarrow \phi_j)$ , für die eine (durch obige Bedingungen eingeschränkte) Wahlfreiheit besteht. Eine übliche Wahl wäre der Single-spin-flip-Metropolis-Algorithmus, der jedoch in der Nähe des kritischen Punktes aufgrund kritischer Phänomene Nachteile aufweist:

1. **Kritische Fluktuationen** bewirken mehr statistische Fluktuationen (Rauschen) und damit einen größeren Fehler in der Approximation (8.1).
2. **Critical slowing down** in der Nähe des Fixpunktes  $T_c$  verursacht ein Ansteigen der Autokorrelationszeiten:

$$\tau \sim L^z \quad \text{für } T \text{ nahe } T_c$$

mit dem **dynamischen Exponenten**  $z > 0$ , der für lokale Algorithmen wie den Single-spin-flip-Metropolis-Algorithmus in der Größenordnung von 2 liegt. Die Rechenzeit für die Simulation einer Korrelationszeit

wächst also nicht nur proportional zur Gittergröße des dreidimensionalen Gitters  $\tau_{\text{CPU}} \sim L^3$ , sondern  $\tau_{\text{CPU}} \sim L^{3+z}$ .

Beide Effekte erhöhen den statistischen Fehler der Messung. Während die kritischen Fluktuationen aus 1. aber eine inhärente physikalische Eigenschaft sind und damit nicht eliminiert werden können (sie sind sogar gerade das, was bei der Untersuchung kritischer Phänomene interessant ist), ist das Critical slowing down aus 2. spezifisch für den verwendeten Algorithmus und kann vermindert werden durch Wechsel des Algorithmus.

Das Problem von Single-spin-flip-Algorithmen in der Nähe des kritischen Punktes ist, dass die Wahrscheinlichkeit eines einzelnen Spin-Flips innerhalb der in diesem Temperatur-Bereich ausgebildeten großen Domänen sehr unwahrscheinlich ist, so dass während der meisten Monte-Carlo-Schritte gar nichts passiert.

### **Wolff-Algorithmus**

Zur Verminderung des Critical slowing down schlug Ulli Wolff 1989 deshalb den **Wolff-Cluster-Algorithmus** vor, bei dem statt einzelner Spins ganze Cluster gleich ausgerichteter Spins geflippt werden. Er funktioniert wie folgt:

1. Wähle zufällig einen Spin (**Seed spin**) aus. Von ihm ausgehend soll ein Cluster gleichgerichteter Spins aufgebaut werden.
2. Betrachte nacheinander alle Nachbarn dieses Spins. Falls der Nachbar in dieselbe Richtung zeigt wie der Seed spin, füge ihn zum Cluster hinzu mit der Addier-Wahrscheinlichkeit
$$P_{\text{add}} = 1 - e^{-2\beta J}. \quad (8.2)$$
3. Für jeden im letzten Schritt hinzugefügten Spin führe wieder Schritt 2. aus. (Beachte dabei: Schon zum Cluster hinzugefügte Spins müssen nicht noch einmal betrachtet werden, wohl aber schon einmal als Nachbarn anderer Cluster-Spins betrachtete, noch nicht zum Cluster gehörende Spins.)
4. Wiederhole Schritt 3. so oft, bis im Cluster kein Spin mehr ist, dessen Nachbarn nicht schon alle betrachtet wurden.
5. Flippe den gesamten Cluster.

Dieser Algorithmus vermindert den dynamischen Exponenten des Single-spin-flip-Metropolis-Algorithmus von  $z \approx 2$  auf  $z \approx 0,3$ .

Die Addier-Wahrscheinlichkeit (8.2) reguliert die Größe der im Wolff-Algorithmus geflippten Cluster entsprechend dem physikalischen Verhalten: Für hohe Temperaturen sind  $P_{\text{add}}$  und damit die gebildeten Cluster klein; für niedrige Temperaturen sind hingegen  $P_{\text{add}}$  und die Cluster groß. In der Nähe der kritischen Temperatur liefert der Wolff-Algorithmus eine interessante Verteilung der **Clustergröße**, s. Abb. 8.1, in der der Anteil der Cluster der (auf die Systemgröße normierten) Größe  $n_{\text{clust}}$  bei  $t = -0,05$  dargestellt ist. Man erkennt eine

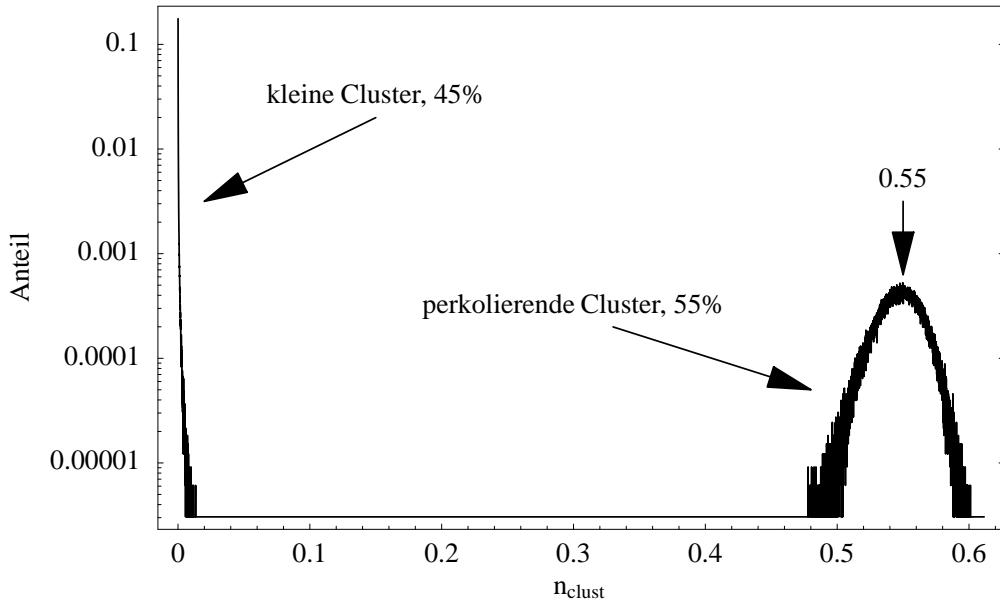


Abb. 8.1: Cluster-Verteilung beim Wolff-Algorithmus bei einem Ising-Gitter der Größe  $32 \times 32 \times 30$  und einer Temperatur von  $T = 0.95T_c$ . Aufgetragen ist die relative Häufigkeit von Clustern der Größe  $n_{\text{clust}}$  (normiert auf die Systemgröße) während der Simulation.

Zwei-Peak-Struktur: 45 % der Cluster liegen in einem Peak nahe bei  $n_{\text{clust}} = 0$  (d. h. es handelt sich um Cluster aus wenigen Spins); die 55 % restlichen Cluster liegen in einem Peak um die Größe  $n_{\text{clust}} = 0,55$ . Diese Cluster-Verteilung erklärt sich für große Gitter und bei periodischen Randbedingungen wie folgt [HW03]: Unterhalb der kritischen Temperatur  $T_c$  gibt es genau einen perkolierenden Cluster, dessen Größe (normiert auf die Systemgröße) im Mittel gleich der spontanen Magnetisierung  $M_s$  (normiert auf die maximale Magnetisierung) ist. Die Wahrscheinlichkeit, im Wolff-Single-Cluster-Algorithmus diesen Cluster auszuwählen, ist gleich dessen Größe, also genauso groß wie die spontane Magnetisierung. In Abb. 8.1 liegen beide Werte übereinstimmend bei 0,55. Zu dieser Erklärung gibt es bei dem hier vorliegenden kleinen Gitter und den anti-periodischen Randbedingungen in  $z$ -Richtung Korrekturen, die die Abweichung vom theoretischen Wert der spontanen Magnetisierung nach (1.3)  $M_s = 0,60$  bei  $t = -0,05$  erklären. Zwischen dem Peak kleiner Cluster und dem Peak perkolierender Cluster liegt eine Lücke, die bei Annäherung an die kritische Temperatur kleiner wird und die sich für  $T \geq T_c$  schließt.

## 8.2 Autokorrelation

Die mit einem Monte-Carlo-Algorithmus erzeugten Konfigurationen sind im Allgemeinen nicht stochastisch unabhängig. Die **Autokorrelationsfunktion** einer Observablen wie etwa der totalen Grenzflächen-Dicke  $w_{B=L}^2$  ist

$$C(i-j) = \langle w_i^2 w_j^2 \rangle - \langle w_i^2 \rangle \langle w_j^2 \rangle,$$

wobei  $w_i^2$  der Wert von  $w_{B=L}^2$  im  $i$ -ten Monte-Carlo-Schritt ist. Daraus erhält man die normierte Autokorrelationsfunktion

$$\chi(t) = \frac{C(t)}{C(0)}.$$

Die **integrierte Autokorrelationszeit**

$$\tau_{\text{int}} = \frac{1}{2} + \sum_{t=1}^{n-1} \chi(t) \quad (8.3)$$

bestimmt den Fehler der Messung des Mittelwertes  $\langle w^2 \rangle$  (s. z. B. [NB99]):

$$\text{var } w^2 = 2\tau_{\text{int}} \frac{C(0)}{n}$$

Der Abstand zweier effektiv unabhängiger Messungen beträgt also  $2\tau_{\text{int}}$ . Deshalb werden die im Kapitel 7 beschriebenen Messungen in einem Abstand größer als  $2\tau_{\text{int}}$  ausgeführt. Als Referenzgröße zur Bestimmung der Korrelationszeit wird dabei die totale Grenzflächendicke  $w_{B=L}^2$  verwendet, da diese die langwelligen Grenzflächen-Fluktuationen und damit die am längsten korrelierten Moden des Systems enthalten sollte.

Ein „natürlicher“, in Ordnung  $\mathcal{O}(\frac{1}{n})$  erwartungstreuer Schätzer für die Autokorrelationsfunktion aus den  $n$  Messwerten einer Monte-Carlo-Kette  $w_1^2, \dots, w_n^2$  ist:

$$C(t) = \frac{1}{n-t} \sum_{i=1}^{n-t} w_i^2 w_{i+t}^2 - \left( \frac{1}{n-t} \sum_{i=1}^{n-t} w_i^2 \right) \left( \frac{1}{n-t} \sum_{i=1}^{n-t} w_{i+t}^2 \right)$$

Für große Zeiten  $t$  wird nur noch über wenige  $i$  „integriert“, so dass die Autokorrelationsfunktion für große Zeiten  $t$  in statistischem Rauschen untergeht. Dies verursacht Probleme beim Schätzen der integrierten Autokorrelationszeit nach (8.3), denn das Rauschen von  $C(t)$  für große  $t$  verursacht beim Aufsummieren eine Divergenz  $\tau_{\text{int}} \xrightarrow{n \rightarrow \infty} \infty$ . Eine Lösung des Problems liegt im Abschneiden der Summe in (8.3) bei einem Cutoff  $M$ :

$$\tau_{\text{int}}(M) = \frac{1}{2} + \sum_{t=1}^M \chi(t)$$

Der Cutoff  $M$  wird mit dem **Automatic Windowing-Algorithmus** nach Sokal [So89] bestimmt:

$$M = \text{kleinste natürliche Zahl mit } M \geq c\tau_{\text{int}}(M)$$

mit einer Zahl  $c$ . In der hier durchgeführten Simulation hat sich ein Wert von  $c = 5$  als praktikabel erwiesen.

Das Resultat der Bestimmung der integrierten Korrelationszeiten  $\tau_{\text{int}}$  der Dicken bei verschiedenen Blockgrößen  $B$  zeigt Abb. 8.2. Die Korrelationszeiten sind durch genügend weit auseinander liegende Messungen wie verlangt kleiner als 1; man kann also von stochastischer Unabhängigkeit der Messungen ausgehen. Die integrierten Autokorrelationszeiten steigen mit der Blockgröße an, so dass sich die Erwartung zunehmender Korrelation mit zunehmender Berücksichtigung langwelligerer Fluktuationen bestätigt.

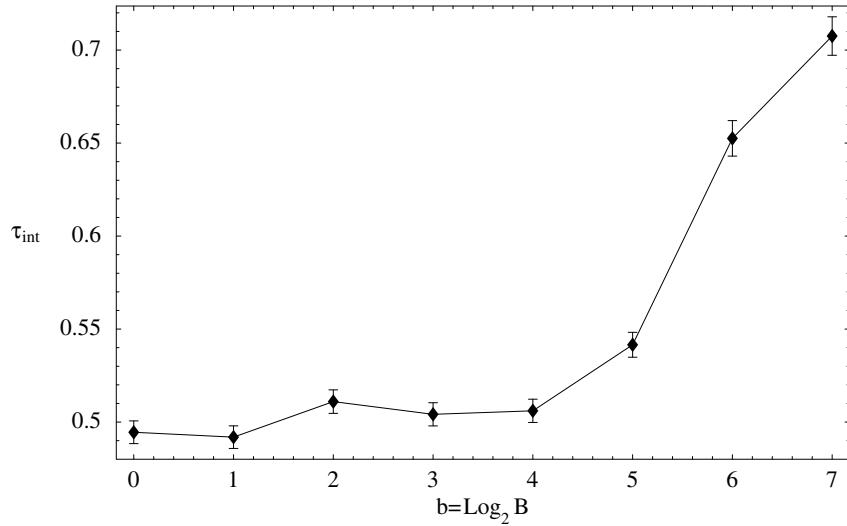


Abb. 8.2: Die integrierte Korrelationszeit  $\tau_{int}$  steigt mit der Blockgröße  $B$ .

### 8.3 Equilibrierung

Die mit einer Monte-Carlo-Simulation erzeugten Konfigurationen müssen vor Beginn der Messung zunächst equilibriert werden. Als Indikator für das Vorliegen des Gleichgewichts wird hier das Verhalten der totalen Grenzflächendicke  $w_{B=L}^2$  genommen, da diese nach der Diskussion im letzten Abschnitt die langwirksamen Fluktuationen der Grenzfläche enthält und zu erwarten ist, dass diese am langsamsten ins Gleichgewicht übergehen. Wenn die totale Dicke sich (bis auf thermische Fluktuationen) nicht mehr ändert, befindet sich das System im Gleichgewicht.

Abb. 8.3 zeigt die (Monte-Carlo-)Zeitentwicklung der totalen Dicke  $w_{B=L}^2$  nach einem **Cold start**, d. h. bei einer Start-Konfiguration mit einer scharfen Grenzfläche in der Mitte des Systems (alle Spins in der unteren Hälfte  $z < \frac{D}{2}$  sind down, alle Spins in der oberen Hälfte  $z \geq \frac{D}{2}$  sind up). Der Gleichgewichtswert von  $w_L^2 \approx 500$  wird, ausgehend vom Start-Wert der Dicke  $w_L^2 \approx 0$  sehr schnell erreicht. Anders ist dies nach einem **Hot start** (Spins zufällig ausgerichtet), vgl. Abb. 8.4. Das System verbleibt zunächst einige Zeit in einem Zustand zufällig ausgerichteter Spins mit einer dementsprechend größeren Dicke  $w_L^2 \approx 800$  (komplett diffuse Grenzfläche); dieser Zustand entspricht der metastabilen symmetrischen Phase mit spontaner Magnetisierung Null. Erst nach ca. 60000 Monte-Carlo-Schritten erfolgt der sprunghafte Übergang in den Gleichgewichtszustand mit  $w_{B=L}^2 \approx 500$ .

Da die Equilibrierung bei einem Cold Start am schnellsten erfolgt, wurde in den Simulationen immer mit einer scharfen Grenzfläche begonnen. Die Equilibrierungszeit  $\tau_{eq}$  wurde nach Augenmaß abgeschätzt, und die Messung erst nach weit über  $100\tau_{eq}$  begonnen, da die Equilibrierung (im Vergleich zur eigentlichen Messung) sehr wenig Zeit kostete.

Zum Test der Equilibrierung wird die gemessene Bulk-Magnetisierung

$$M_{\text{bulk}} = m^{B=L}(D)$$

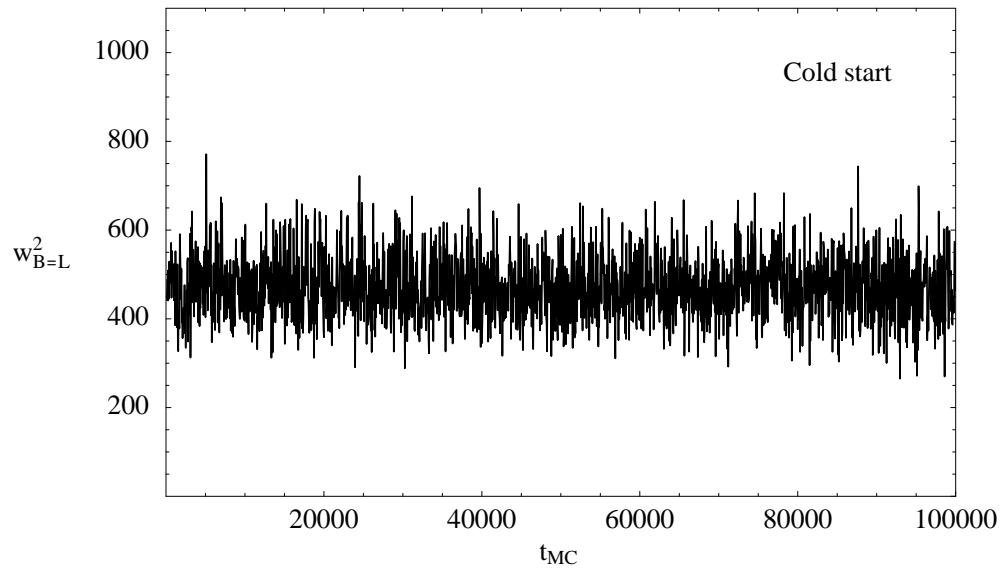


Abb. 8.3: Equilibrierung der totalen Dicke  $w_{B=L}^2$  nach einem Cold start bei einer reduzierten Temperatur  $t = -0,01$  in einem System der Größe  $128 \times 128 \times 100$ .

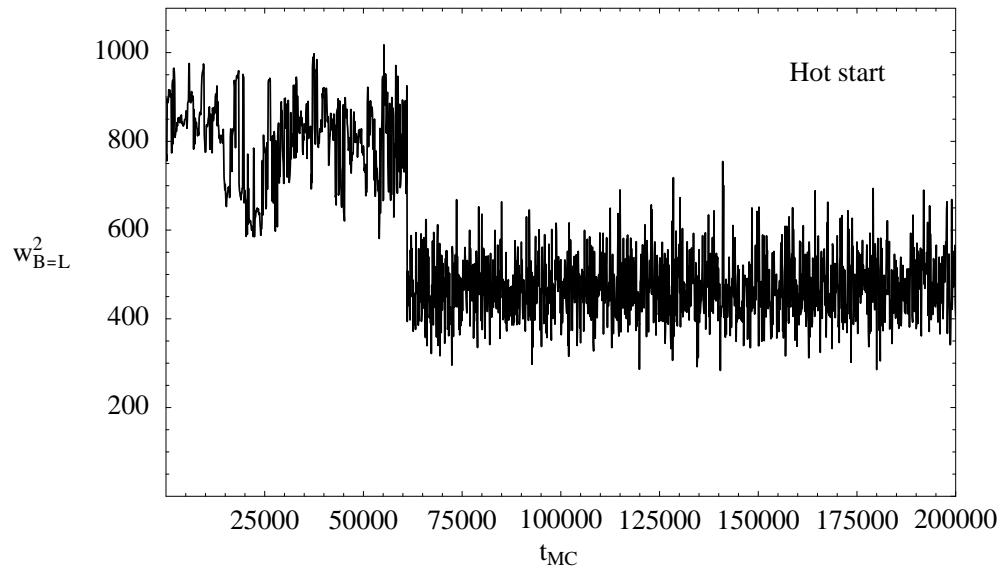


Abb. 8.4: Equilibrierung der totalen Dicke  $w_{B=L}^2$  nach einem Hot start, sonstige Parameter wie in Abb. 8.3.

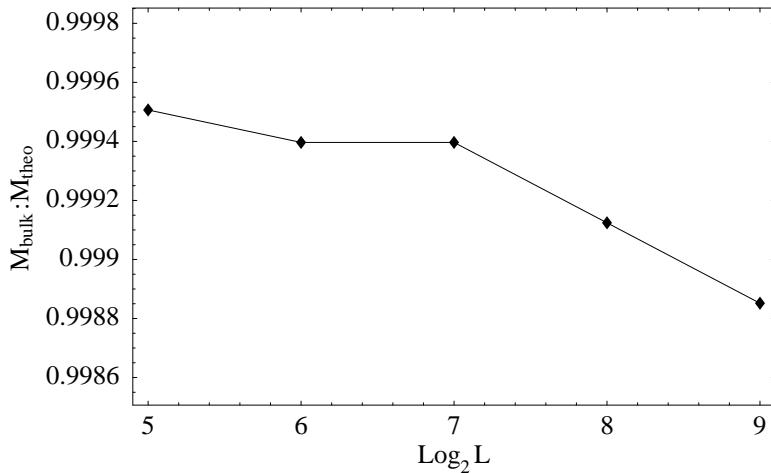


Abb. 8.5: Vergleich der gemessenen Bulk-Magnetisierung  $M_{\text{bulk}}$  mit der theoretischen Bulk-Magnetisierung  $M_{\text{theo}}$  für verschiedene Systemgrößen  $L$ . Der Quotient beider Größen liegt nahe bei 1.

verglichen mit dem theoretischen Wert der Bulk-Magnetisierung nach Formel (1.3). Das Resultat zeigt Abb. 8.5. Der Quotient  $M_{\text{bulk}} : M_{\text{theo}}$  liegt nahe bei 1. Das Gleichgewicht ist aber noch nicht vollständig erreicht; bei längerer Simulation würde der Wert der Bulk-Magnetisierung weiter steigen. Die Güte der Equilibrierung sinkt mit steigender Systemgröße, da bei größeren Systemen aus Rechenzeit-Gründen nicht mehr über so viele Korrelationszeiten equilibriert wurde wie bei kleineren Systemen.

## 8.4 Testen auf Normalverteilung

Nach der Kapillarwellen-Theorie sind die Grenzflächenpositionen  $h$  für eine Blockgröße Gauß-verteilt:  $P^B(h) \sim \mathcal{N}(0, s^2)$ . Um dies zu testen, wird ein statistischer nichtparametrischer Test auf Normalverteilung durchgeführt. Da die vorliegenden Daten  $P^B(h)$  die Häufigkeit in endlichen Intervallen  $\Delta h = [h - \frac{1}{2}, h + \frac{1}{2}]$  der Länge 1 angeben, bietet sich ein  **$\chi^2$ -Anpassungstest auf Normalverteilung** an. Die Nullhypothese ist dabei:

$$H_0 : P^B(h) \text{ ist eine Normalverteilung.}$$

Sie wird getestet gegen die Alternativ-Hypothese

$$H_1 : P^B(h) \text{ ist keine Normalverteilung.}$$

Zunächst werden der Mittelwert  $\text{mean}(h)$  und die Varianz  $\text{var}(h)$  nach einer der Methoden aus Abschnitt 7.4 aus den Daten geschätzt. Falls die Nullhypothese zutrifft, sollten im Intervall  $[h - \frac{1}{2}, h + \frac{1}{2}]$

$$E_h = n \cdot \int_{h - \frac{1}{2}}^{h + \frac{1}{2}} dh' \frac{1}{\sqrt{2\pi\text{var}(h)}} e^{-(h' - \text{mean}(h))^2 / 2\text{var}(h)}$$

Datenpunkte liegen, wobei  $n$  die Gesamtzahl der aufgetretenen Datenpunkte ist. Bei der Monte-Carlo-Simulation treten aber die im Allgemeinen davon abweichenden Frequenzen

$$O_h = n \cdot P^B(h)$$

auf. Als Test für die Nullhypothese dient nun die  $\chi^2$ -Statistik

$$\chi_{\text{Test}}^2 = \sum_h \frac{(O_h - E_h)^2}{E_h}.$$

$\chi_{\text{Test}}^2$  ist für große  $n$ , bei stochastisch unabhängigen Daten (was aufgrund der Messungen im Abstand von mehr als zwei integrierten Korrelationszeiten der Fall ist) und mindestens 5 Datenpunkten in einem Intervall (was durch eventuelles Zusammenfassen von Intervallen erreicht wird)  $\chi_{n-3}^2$ -verteilt. Dabei ist die Anzahl der Freiheitsgrade  $n$  um 3 vermindert, da die Gesamtzahl der Daten fest und  $\text{mean}(h)$  sowie  $\text{var}(h)$  aus den Daten geschätzt wurden.

Die Wahrscheinlichkeit, dass bei Zutreffen der Nullhypothese der Wert  $\chi_{\text{Test}}^2$  oder ein größerer Wert auftritt, ist

$$p = P(X \geq \chi_{\text{Test}}^2) = \chi_{n-3,1-p}^2$$

für eine  $\chi_{n-3}^3$ -verteilte Zufallsgröße  $X$ , also gerade das  $(1-p)$ -Quantil  $\chi_{n-3,1-p}^2$  der  $\chi_{n-3}^3$ -Verteilung. Die **Signifikanz**  $p$  erlaubt nun die Entscheidung über das Ablehnen der Nullhypothese: Ist  $p$  klein (üblicherweise kleiner als 0,05 oder 0,01), so verwirft man die Nullhypothese. Ist  $p$  größer, so kann man sie zumindest nicht ausschließen. Die Signifikanz  $p$  gibt dabei die Wahrscheinlichkeit eines Fehlers der ersten Art an, d. h. die Wahrscheinlichkeit für eine Ablehnung der Nullhypothese, obwohl diese doch zutrifft.

## 8.5 Fehlerrechnung: Binning

Die Messwerte  $f_1, \dots, f_n$  einer Observablen  $f$  sind aufgrund der Messung im Abstand  $> 2\tau_{\text{int}}$  stochastisch unabhängig, so dass ihr Fehler zu

$$\text{var } f = \frac{C(0)}{n-1} \tag{8.4}$$

geschätzt werden kann. Bei Observablen, die nicht einfach als arithmetisches Mittel der Monte-Carlo-Daten berechnet, sondern aus allen Einzelmessungen auf kompliziertere Weise bestimmt werden, ist eine Berechnung des Fehlers nach (8.4) nicht möglich. Beispiele für solche Observablen sind die Varianz  $\text{var}(h)$  der Verteilung  $P^B(h)$  der Grenzflächenpositionen aus Abschnitt 7.3 sowie die Grenzflächendicke des mittleren Grenzflächenprofils aus Abschnitt 7.7, allgemein irgendeine Funktion

$$A = F(f_1, \dots, f_n).$$

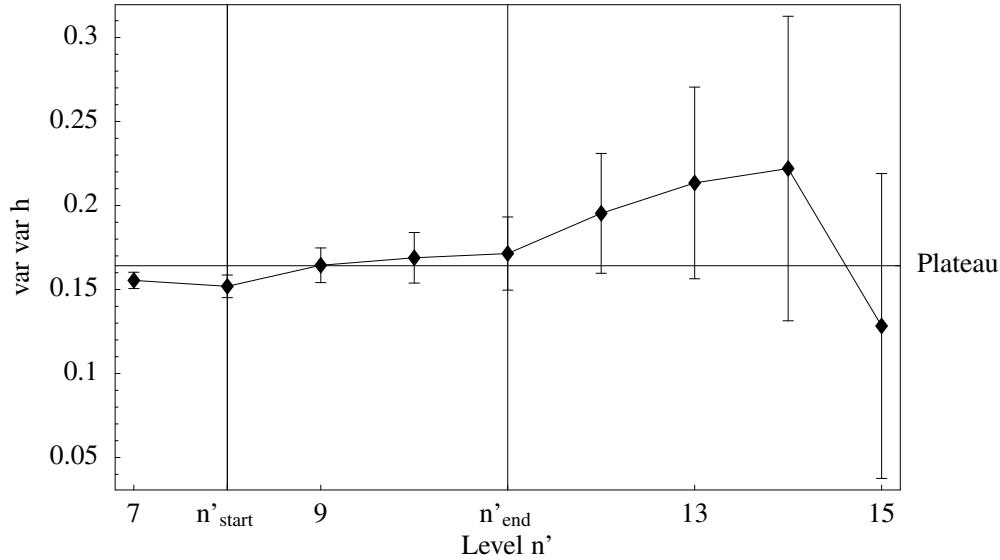


Abb. 8.6: Fehler  $\text{var var } h$  der Varianz  $\text{var } h$  bei Level  $n'$  der Blocktransformation. Bei  $n'_{\text{start}}$  wird das Fixpunkt-Plateau erreicht, bei  $n'_{\text{end}}$  wird es wieder verlassen.

In diesem Fall kann der Fehler in einem **Binning**-Verfahren nach Flyvbjerg und Petersen [FP89] bestimmt werden. Dazu wird eine Blocktransformation

$$f'_i := \frac{1}{2} (f_{2i+1} + f_{2i}), \quad i = 1, \dots, n' = \frac{n}{2} \quad (8.5)$$

durchgeführt und der Fehler abgeschätzt aus den neuen Werten:

$$\text{var}(A') = \frac{C'(0)}{n' - 1}$$

Fixpunkt der Blocktransformation (8.5) ist

$$\left( \frac{C(t)}{n-1} \right)_{t=0,1,2,\dots} \sim (\delta_{t,0})_{t=0,1,2,\dots}$$

mit einem Attraktionsbereich von Autokorrelationsfunktionen  $C(t)$ , die schneller abfallen als  $\frac{1}{t}$ . Am Fixpunkt sind also die Datenpunkte stochastisch unabhängig ( $C(t) \sim \delta_{t,0}$ ) und Gauß-verteilt (zentraler Grenzwertsatz), so dass man den Fehler (sowie dessen Fehler) nach Erreichen des Fixpunktes leicht angeben kann:

$$\text{var}(A) = \frac{C(0)}{n-1} \pm \sqrt{\frac{2}{n-1} \frac{C(0)}{n-1}} \quad (8.6)$$

Als Beispiel für das Binning-Verfahren ist der Fehler  $\text{var var } h$  der Varianz der Grenzflächenposition  $\text{var } h$  in Abb. 8.6 für verschiedene Level  $n'$  der Blocktransformation dargestellt. (Bei  $\text{var var } h$  bezeichnet das erste „var“ den statistischen Fehler, das zweite „var“ die Varianz der Verteilung  $P^B$ ). Der Fehler ist erst ab dem Binning-Level  $n' = 7$  dargestellt, bei dem das Plateau des Fixpunktes

schon fast erreicht wurde. Der schlieflich als Fehler der Varianz var verwendete Wert ist das arithmetische Mittel der vier Werte zwischen  $n' = n'_{\text{start}}$  und  $n' = n'_{\text{end}}$ . Nach Verlassen des Fixpunkt-Plateaus fluktuiert der Fehler durch statistisches Rauschen aufgrund der für hohe Level geringen Datenzahl.

# Kapitel 9

## Ergebnisse

In diesem Kapitel werden die Ergebnisse der Monte-Carlo-Simulationen im Hinblick auf die Fragestellungen aus Abschnitt 6.2 diskutiert. Dabei wird (nach einer Übersicht über die gewählten Parameter in Abschnitt 9.1) zunächst anhand der Verteilung der Grenzflächenpositionen die Kapillarwellen-Theorie getestet und dabei der Cutoff  $B_{\text{KW}}$  abgeschätzt (Abschnitt 9.2). Dann wird nach einer kurzen Diskussion des Grenzflächenprofils (Abschnitt 9.3) die Dicke der Grenzfläche betrachtet, wobei die in Teil I beschriebenen Theorien getestet und der Cutoff  $B_{\text{intr}}$  abgeschätzt werden (Abschnitt 9.4).

### 9.1 Parameter

Es wurden Monte-Carlo-Simulationen des dreidimensionalen Ising-Modells für Systemlängen  $L$  zwischen 32 und 512 Gitterkonstanten bei drei verschiedenen reduzierten Temperaturen  $t = \frac{T-T_c}{T_c}$  durchgeführt:

- $t = -0,01$ . Die Korrelationslänge beträgt in diesem Fall  $\xi = 4,56$  (Gitterkonstanten); es wurden Systemgrößen  $L = 32, 64, 128, 256, 512$  verwendet. Damit sollte man sowohl intrinsisches als auch Kapillarwellen-Verhalten beobachten können.
- $t = -0,05$ . In diesem Fall ist die Korrelationslänge  $\xi = 1,65$ ; also zu klein, um intrinsisches Verhalten zu sehen. Diese Simulationsreihe dient vor allem dem Test der Kapillarwellen-Theorie, die für große  $L/\xi$  gültig sein sollte. Verwendete Systemgrößen:  $L = 32, 64, 128, 256$ .
- $t = -0,004$ . Bei dieser Temperatur ist die Korrelationslänge  $\xi = 8,13$ ; es werden Systemgrößen  $L = 64, 128, 256$  betrachtet. Diese Simulationsreihe dient vor allem der Untersuchung der Mean-field-Theorie.

Die Ausdehnung  $D$  senkrecht zur Grenzflächenrichtung wurde stets so groß gewählt, dass sie groß gegen die Grenzflächendicke  $w$  ist, so dass die Grenzfläche frei fluktuieren kann, aber auch so klein, dass sich nicht zu viele Fluktuationen und Bubbles in den homogenen Phasen oder mehrere Grenzflächen ausbilden.

Mit den Gleichungen (2.9) - (2.11) für das kritische Verhalten der Korrelationslänge und Oberflächenspannung hat man bei den verwendeten Temperaturen die in der folgenden Tabelle aufgeführten Parameterwerte (in Einheiten der Gitterkonstanten  $a$ ):

$t$	$\xi$	$\sigma$	$w_{\text{intr}}^2$ ( $p \sim c'^2$ )	$w_{\text{intr}}^2$ ( $p \sim c'$ )	$A_{\text{KW}} = \frac{\ln 2}{4\pi\sigma}$ ( $p \sim c'^2$ )	$A_{\text{KW}} = \frac{\ln 2}{2\pi\sigma}$ ( $p \sim c'$ )
-0,050	1,65(1)	0,036(1)	3,53(2)	9,00(6)	1,55(5)	3,1(1)
-0,010	4,56(4)	0,0047(2)	26,8(2)	68,4(6)	11,8(4)	23,7(8)
-0,004	8,13(6)	0,00147(5)	85,2(6)	217(2)	38(1)	75(3)

## 9.2 Verteilung der Grenzflächenpositionen

Die Kapillarwellen-Theorie beschreibt die Grenzfläche als schwingende Membran  $h(x, y)$ , deren Position verteilt ist gemäß einer Normalverteilung (6.9), (6.10)

$$h \sim \mathcal{N}(0, s^2) \quad \text{mit} \quad s^2 = \frac{\ln 2}{2\pi\sigma} \log_2 \frac{L}{B_{\text{KW}}}$$

mit dem Kapillarwellen-Cutoff  $B_{\text{KW}}$ . Diese Vorstellung der Grenzfläche soll in diesem Abschnitt untersucht werden.

Zur **Veranschaulichung** sind in Abb. 9.1a) - 9.1c) Momentaufnahmen der Grenzflächen-Membran gezeigt für verschiedene „Auflösungen“, d. h. für verschiedene Blockgrößen  $B$ , gewonnen aus den lokalen Grenzflächenpositionen  $h_i^B$  aus Abschnitt 7.3 einer beliebigen Monte-Carlo-Konfiguration. Für kleine Blockgrößen ist die Grenzfläche ein sehr raues Gebirge; hier trifft das makroskopische Kapillarwellen-Modell noch nicht zu. Erst für größere Blockgrößen  $B = 4, 8, 16$  sieht die Momentaufnahme aus wie eine dem Kapillarwellen-Modell entsprechende schwingende Membran. Für Blockgrößen  $B=64, 128$  in der Nähe der Systemgröße  $L=128$  ist die Auflösung so gering, dass die Grenzfläche nahezu flach ist.

### 9.2.1 Verteilung und Momente

Ein genauerer Test des Kapillarwellen-Modells kann mit der **Verteilung  $P(h)$  der Grenzflächenpositionen**  $h$  aus Abschnitt 7.4 durchgeführt werden. Diese zeigen tatsächlich Gauß-ähnliche Peaks, s. Abb. 9.2. Für kleine Blockgrößen  $B$  sind diese sehr breit (sogar bei  $t = \pm 50 = \pm \frac{D}{2}$  liegt noch ein nennenswerter Anteil der Grenzflächenpositionen) und werden für größere Blockgrößen schmäler. Ursache ist das Ausintegrieren kurzwelliger Fluktuationen kleiner als die Blockgröße. Dieses Verhalten folgt den Formeln (6.9) und (6.10), in der die Blockgröße  $B$  dem Kapillarwellen-Cutoff  $B_{\text{KW}}$  entspricht. Für  $B=L$  schließlich sind alle Fluktuationen abgeschnitten, und die Normalverteilung entartet zu einem  $\delta$ -Peak.

Abb. 9.2 zeigt zusätzlich **Gauß-Fits** an die Verteilungen  $P(h)$ . Für kleine Blockgrößen weichen die gemessenen Verteilungen deutlich ab; sie sind leptokurtisch (sie sind spitzer und haben weitere Ausläufer als ein Gauß-Peak). Für

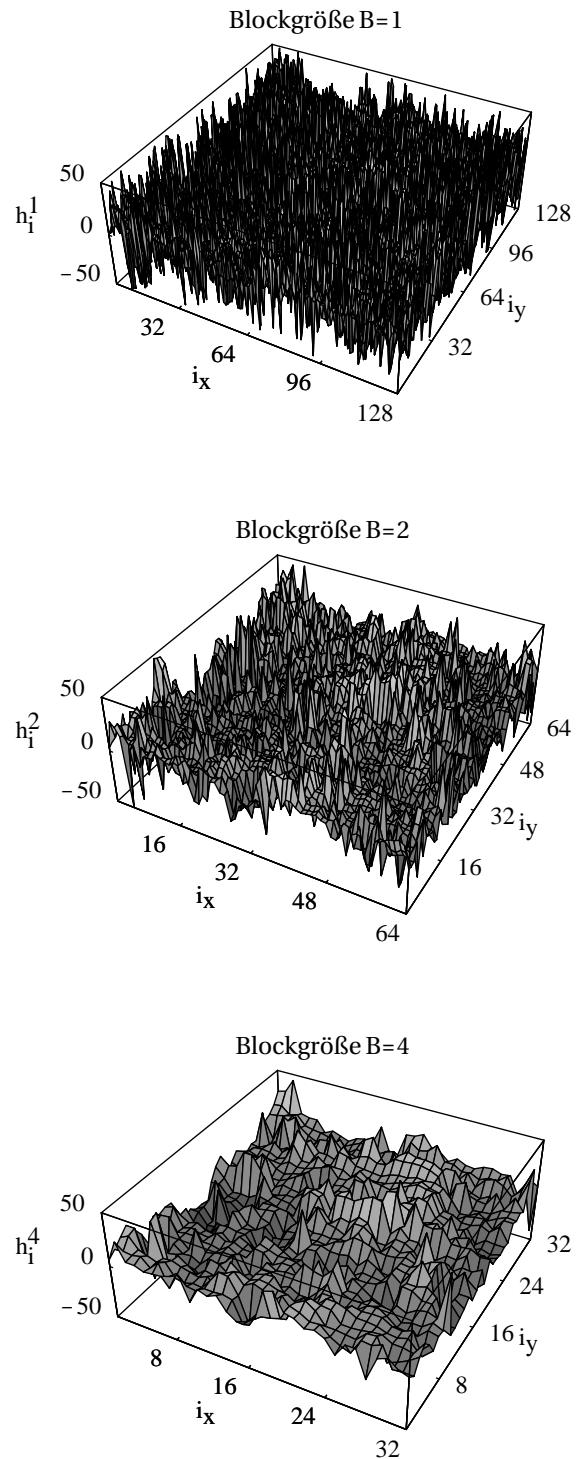


Abb. 9.1a): Momentaufnahme der lokalen Grenzflächenpositionen  $h_i^B$  an ihren Koordinaten  $i_x, i_y$  für Blockgrößen  $B=1, 2, 4$  bei  $t = -0,01$  und  $L=128$ .

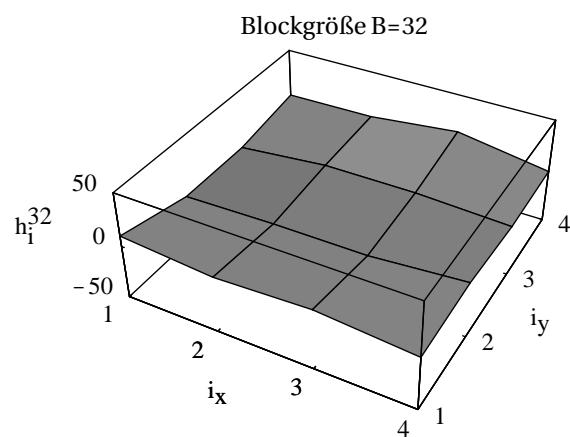
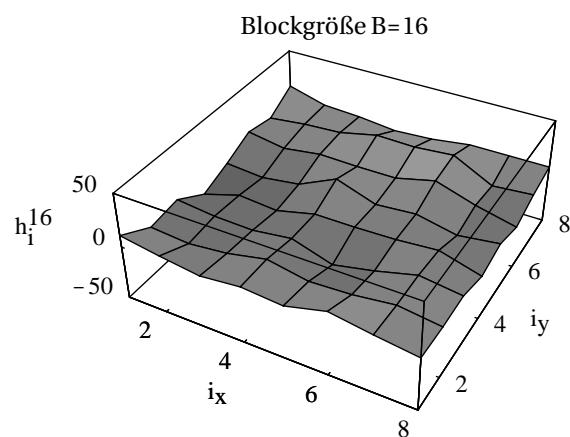
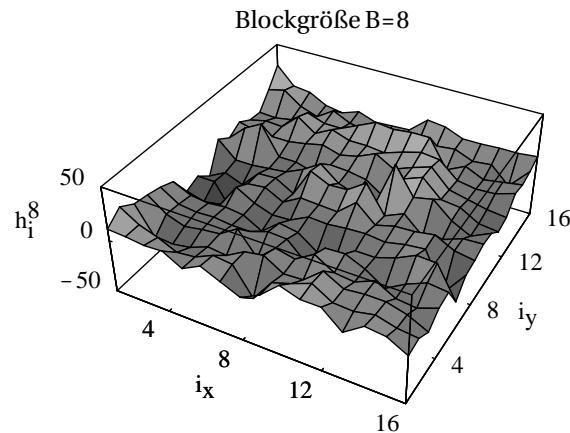


Abb. 9.1b): Momentaufnahme der lokalen Grenzflächenpositionen  $h_i^B$  an ihren Koordinaten  $i_x, i_y$  für Blockgrößen  $B=8, 16, 32$  bei  $t = -0,01$  und  $L=128$ .

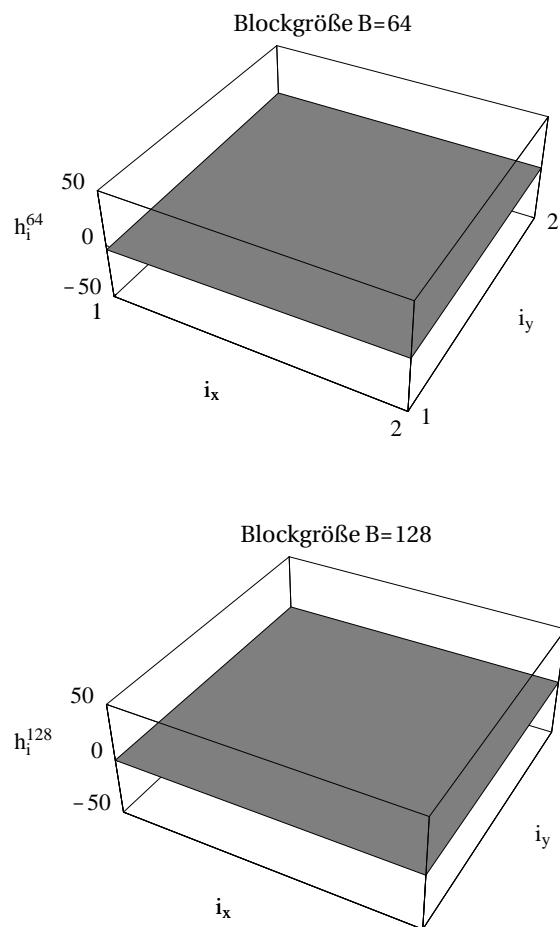


Abb. 9.1c): Momentaufnahme der lokalen Grenzflächenpositionen  $h_i^B$  an ihren Koordinaten  $i_x, i_y$  für Blockgrößen  $B=64, 128$  bei  $t = -0,01$  und  $L=128$ .

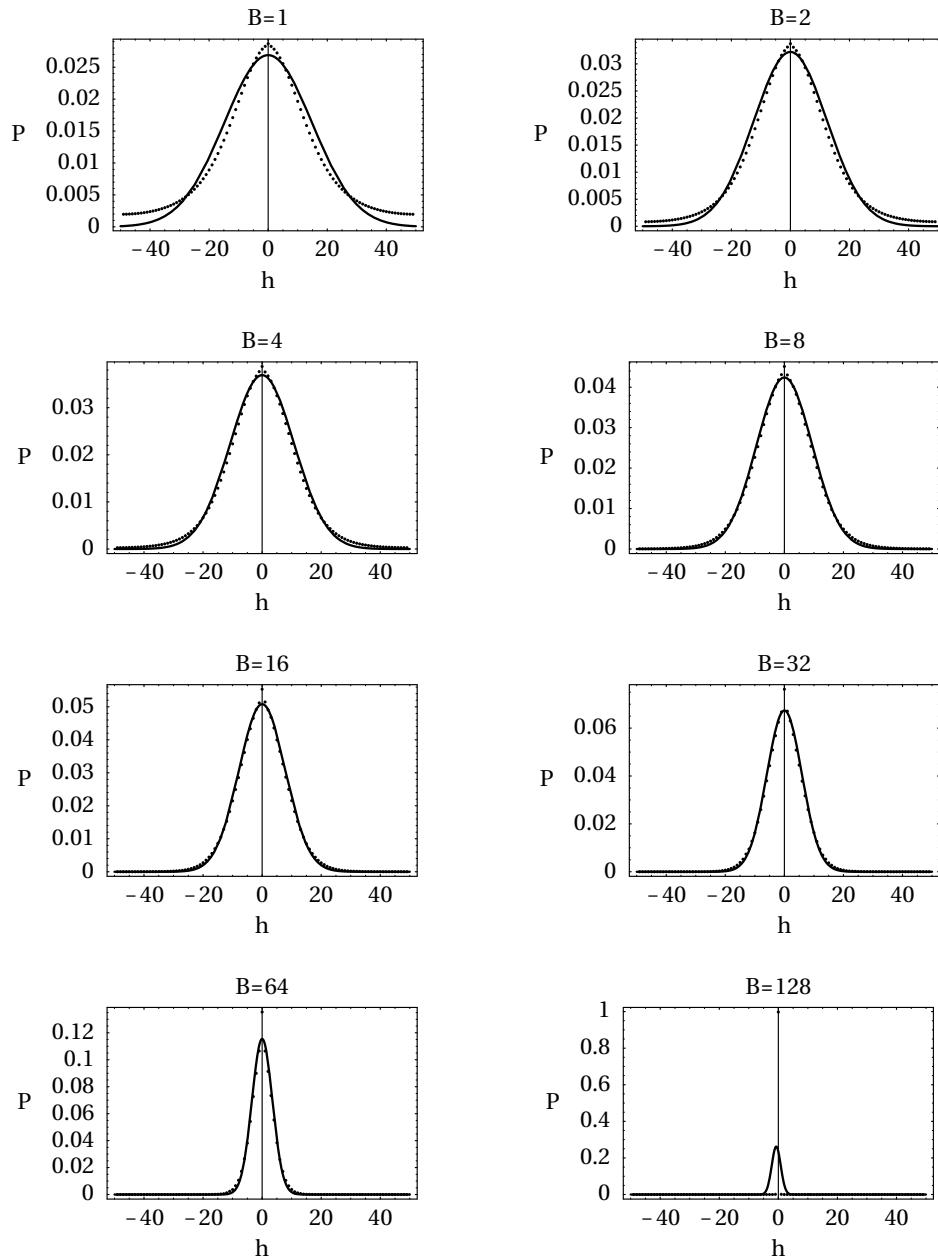


Abb. 9.2: Verteilungen der Grenzflächenposition  $P(h)$  bei  $t = -0,01$  und  $L = 128$  (Punkte) mit Least-Square-Gauß-Fits (durchgezogene Linien).

größere Blockgrößen passen die Gauß-Fits besser; lediglich beim  $\delta$ -Peak für  $B=L$  versagt die Fit-Routine des Computeralgebra-Programmes MATHEMATICA.

Aus den Gauß-Fits mit

$$\frac{1}{\sqrt{2\pi b}} e^{-(h-a)^2/2b}$$

wird die Varianz als Parameter  $b$  geschätzt:

$$\text{var}(h) \Big|_{\text{Gauß}} = b$$

Zusätzlich zu der aus den Gauß-Fits bestimmten Varianz werden die ersten vier **Momente** der Verteilung  $P(h)$  in üblicher Weise geschätzt (s. Abschnitt 7.4). Aus Symmetriegründen müssen Mittelwert  $\text{mean}(h)$  und Skewness  $\text{skew}(h)$  gleich Null sein; dies ist in der Tat der Fall, s. Abb. 9.3. Die Varianz  $\text{var}(h)$ , eine wichtige Kenngröße der von der Kapillarwellen-Theorie vorhergesagten Gauß-Verteilung, wird im nächsten Abschnitt diskutiert. Die (Exzess-) Kurtosis  $\text{kurt}(h)$  sollte nach der Kapillarwellen-Theorie gleich Null sein; dies ist (bei  $t = -0,01$  und  $L=128$ ) nicht gut erfüllt. Die Kurtosis ist positiv, im Einklang mit der Beobachtung aus dem letzten Abschnitt, dass die Verteilungen leptokurtisch sind. Für niedrigere Temperaturen  $t$  bzw. größere Systemlängen  $L$  (d. h. ein größeres Verhältnis  $L/\xi$ ) ist die Kurtosis kleiner, vgl. Abb. 9.4, also das Kapillarwellen-Modell wie zu erwarten besser erfüllt.

Die Kurtosis sollte mit der Blockgröße abnehmen, da für größere Blockgrößen das Kapillarwellen-Modell immer besser gilt. Für  $t = -0,01$  zeigt sich ein unphysikalischer Anstieg bei Blockgrößen  $B \leq 4$ , der auf Gitterartefakte zurückzuführen ist (in diesem Bereich ist  $B \leq \xi = 4,56$ ). Bei  $t = -0,05$  tritt dieses Verhalten wegen  $\xi = 1,65$  nicht auf.

### 9.2.2 Untersuchung der Varianz

Die Varianz der Verteilung  $P(h)$  der Grenzflächenpositionen ist nach der Kapillarwellen-Theorie (6.10)

$$\boxed{\text{var}(h) = \frac{1}{2\pi\sigma} \log_2 \frac{L}{B},}$$

wobei die Blockgröße  $B$  die Rolle des Kapillarwellen-Cutoffs  $B_{\text{KW}}$  übernimmt. Die Varianz sollte sich also sowohl als Funktion des Logarithmus der Systemgröße als auch als Funktion des Logarithmus der Blockgröße linear verhalten mit einer Steigung gleichen Betrags. Die Untersuchungen werden für die Temperatur  $t = -0,05$  diskutiert, da hier das Kapillarwellen-Modell aufgrund des hohen Verhältnisses  $L/\xi$  am besten erfüllt sein sollte. Für die anderen untersuchten Temperaturen  $t = -0,01$  und  $t = -0,004$  ergibt sich ein qualitativ identisches Verhalten; lediglich die quantitative Übereinstimmung mit den theoretischen Werten ist etwas schlechter.

Die Varianz wird auf zwei Arten aus der Verteilung  $P(h)$  bestimmt: zum einen als üblicher Schätzer, zum anderen aus einem Gauß-Fit an die Verteilung (Abschnitt 7.4). Abb. 9.5 und Abb. 9.6 zeigen die beiden Varianzen als Funktion

des Logarithmus der Systemgröße L. In beiden Fällen hat man, insbesondere für größere Blockgrößen  $b = \log_2 B$ , die erwarteten linearen Anstiege, und die Geraden für verschiedene Blockgrößen sind nahezu parallel. Abb. 9.7 und Abb. 9.8 zeigen dieselben Daten, diesmal aufgetragen als Funktion des Logarithmus der Blockgröße B. Der von der Kapillarwellen-Theorie vorhergesagte lineare Abfall ist hier nur für größere Blockgrößen gegeben (nur dort sollte die Kapillarwellen-Theorie ja auch gültig sein) und für die aus den Gauß-Fits erhaltenen Varianzen besser als für die geschätzten Varianzen. Die Geraden für verschiedene Systemlängen L sind wiederum nahezu parallel. Die Kapillarwellen-Theorie ist also zumindest qualitativ gut erfüllt.

Für eine quantitative Analyse sind in Abb. 9.9 bzw. Abb. 9.10 Steigung bzw. Achsenabschnitt der linearen Fits an die Varianzen aus Abb. 9.5 bis Abb. 9.8 gezeigt. Die Steigungen sollten

$$\text{Steigung} = \pm \frac{\ln 2}{2\pi\sigma} = 3.1(1)$$

sein (wobei „+“ für die Varianzen als Funktion von  $\log_2 B$  und „–“ für die Varianzen als Funktion von  $\log_2 L$  gilt). Dies ist recht gut erfüllt, s. Abb. 9.9, insbesondere für größere Blockgrößen B und für die Varianzen aus den Gauß-Fits.

Die Achsenabschnitte der linearen Fits an die Varianzen sollten Geraden sein:

$$\text{Achsenabschnitt} = \frac{\ln 2}{2\pi\sigma} \log_2 L$$

für die Varianzen als Funktion von  $\log_2 B$  bzw.

$$\text{Achsenabschnitt} = -\frac{\ln 2}{2\pi\sigma} \log_2 B$$

für die Varianzen als Funktion von  $\log_2 L$ . Die gemessenen Achsenabschnitte liegen recht gut auf den theoretischen Geraden, s. Abb. 9.10.

Insgesamt stimmen die gemessenen Varianz-Daten recht gut mit den von der Kapillarwellen-Theorie vorhergesagten Werten überein, wobei die Übereinstimmung für die aus den Gauß-Fits bestimmten Varianzen besser ist als für die geschätzten Varianzen. Dies dürfte daran liegen, dass bei der ersten Methode schon eine Vorhersage der Kapillarwellen-Theorie, nämlich eine Gauß-Verteilung, *vorausgesetzt* wurde. Diese Vorhersage soll nun untersucht werden.

### 9.2.3 Test auf Normalverteilung

Um zu testen, ob die Verteilung P(h) der Grenzflächenpositionen Gauß-verteilt ist, wird ein  $\chi^2$ -Anpassungstest benutzt wie in Abschnitt 8.4 beschrieben. Zur Durchführung des Tests wurden die aus den Gauß-Fits bestimmten Varianzen verwendet, da sie die höchsten Signifikanzlevel zeigten.

Abb. 9.11 zeigt den Signifikanzlevel p bei der Temperatur  $t = -0,05$  für verschiedene Blockgrößen B und Systemgrößen L. Für kleine Systemlängen ist der Signifikanzlevel p stets Null; eine Normalverteilung kann somit ausgeschlossen

werden. Die Systemgrößen sind so klein, dass das Kapillarwellen-Modell noch eine schlechte Beschreibung liefert. Für größere Systemgrößen und Blockgrößen  $b = \log_2 B \gtrsim 3$  hingegen ist der Signifikanzlevel von Null verschieden, und man kann davon ausgehen, dass die Daten entsprechend der Kapillarwellen-Theorie normalverteilt sind. Da bei der Temperatur  $t = -0,05$  die Korrelationslänge  $\xi = 1,65$  beträgt, liegt der Gültigkeitsbereich der Kapillarwellen-Theorie also bei ca.

$$B \gtrsim 5\xi.$$

Der Abfall der Signifikanz bei sehr großen Blockgrößen  $B$  hängt mit der dann vorliegenden Schärfe des Peaks von  $P(h)$  zusammen, der zu einem schlechteren Resultat beim Normalverteilungs-Test führt.

Für  $t = -0,01$  erhält man ein ähnliches Ergebnis für den Signifikanzlevel, s. Abb. 9.12. Wieder ist erst für große Systemlängen und für größere Blockgrößen die Signifikanz  $p$  von Null verschieden, und man kann den Gültigkeitsbereich der Kapillarwellen-Theorie zu

$$B \gtrsim 7\xi$$

abschätzen.

Insgesamt ist also die Kapillarwellen-Theorie bei größerem Verhältnis  $L/\xi$  qualitativ sehr gut und quantitativ gut erfüllt, sowohl was die Vorhersage einer Normalverteilung als auch das Verhalten der Varianz dieser Normalverteilung betrifft. Man kann aus dem Test auf Normalverteilung den Gültigkeitsbereich der Kapillarwellen-Theorie und damit den Kapillarwellen-Cutoff abschätzen zu

$B_{\text{KW}} \sim (5 - 7)\xi.$

(9.1)

### 9.3 Grenzflächen-Profile

In der Faltungsnäherung wird das intrinsische tanh-Profil  $\phi_g$  ausgeschmiert mit der Kapillarwellen-Verteilung  $P(h)$  zum Gesamtprofil (6.11)

$$c(z) = \phi_g(z) * P(h).$$

Dabei ist  $P(h)$  eine Gauß-Verteilung mit Varianz (6.10)

$$s^2 = A_{\text{KW}} \log_2 \frac{B}{B_{\text{KW}}}.$$

Das intrinsische tanh-Profil wird umso stärker verbreitert, je größer die Systemlänge  $L$  bzw. die hier deren Rolle spielende Blockgröße  $B$  ist (vgl. Gl. (6.16)).

Die Profile für verschiedene Größenskalen (Blockgrößen) sind in Abb. 7.11 und 7.12 jeweils in der linken Spalte dargestellt. Abb. 9.13 zeigt alle diese Profile in einem Diagramm. Für kleine Blockgrößen sieht man den bereits diskutierten unphysikalischen „Haken“; für größere Blockgrößen hat man die erwarteten glatten tanh-ähnlichen Profile, die für wachsende Blockgrößen in der Tat immer breiter werden.

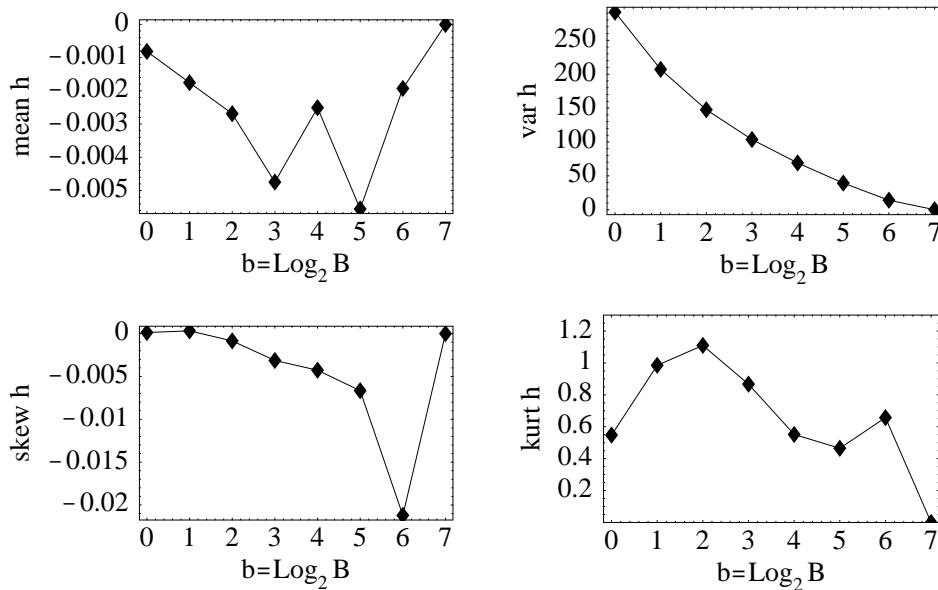


Abb. 9.3: Aus den Verteilungen  $P(h)$  aus Abb. 9.2 geschätzte Momente.

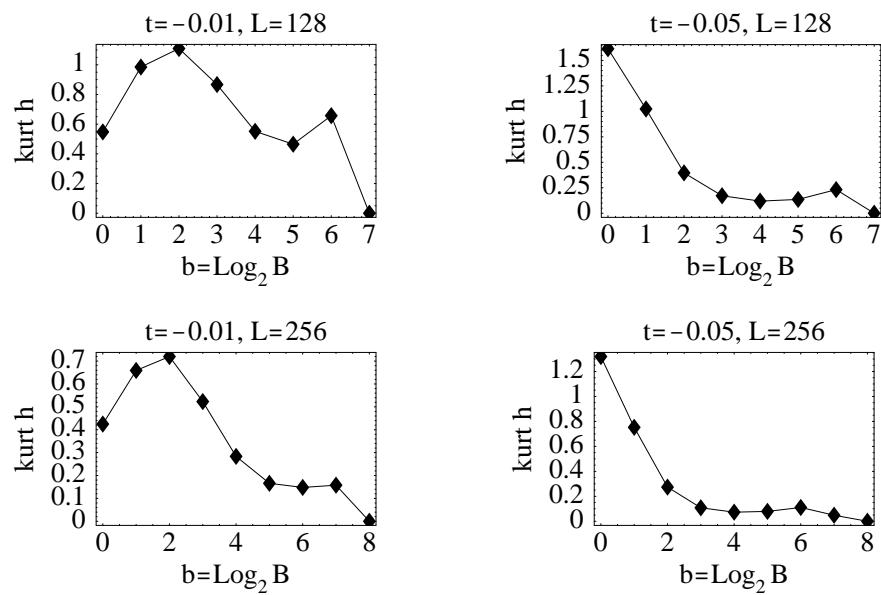


Abb. 9.4: Kurtosis der Verteilung  $P(h)$  für die angegebenen Temperaturen  $t$  und Systemgrößen  $L$ .

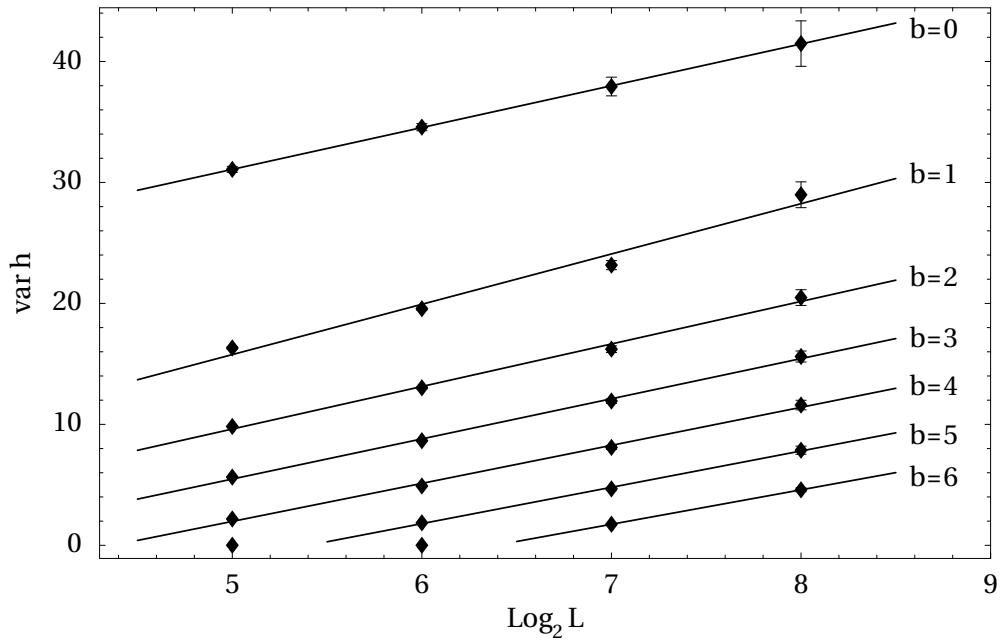


Abb. 9.5: Geschätzte Varianzen  $\text{var}(h)$  als Funktion des Logarithmus der Systemgröße  $L$  bei  $t = -0,05$  für die angegebenen Blockgrößen  $b = \log_2 B$ .

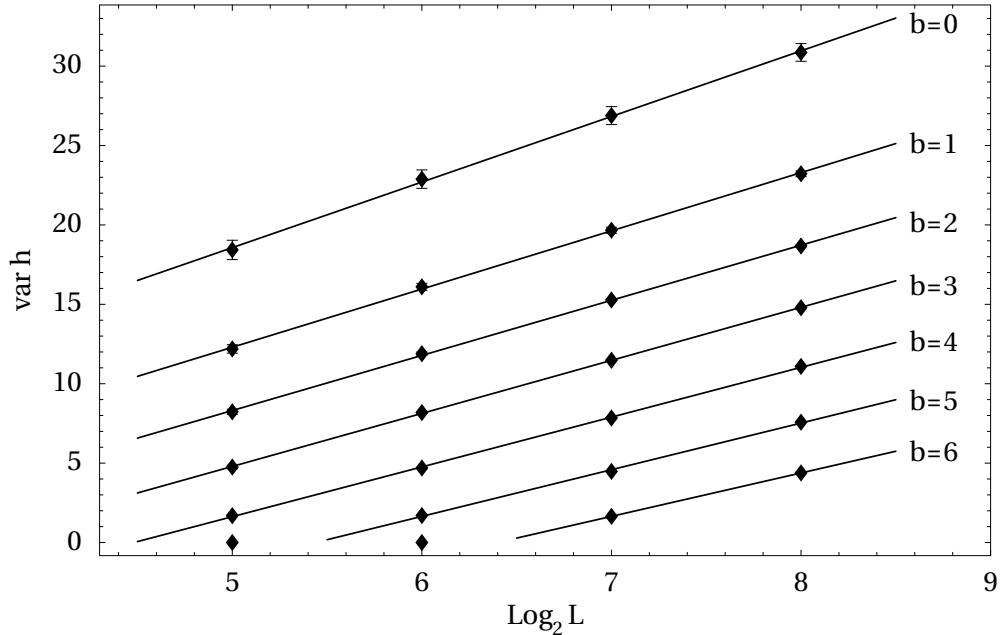


Abb. 9.6: Aus Gauß-Fits bestimmte Varianzen  $\text{var}(h)$  als Funktion des Logarithmus der Systemgröße  $L$  bei  $t = -0,05$  für die angegebenen Blockgrößen  $b = \log_2 B$ .

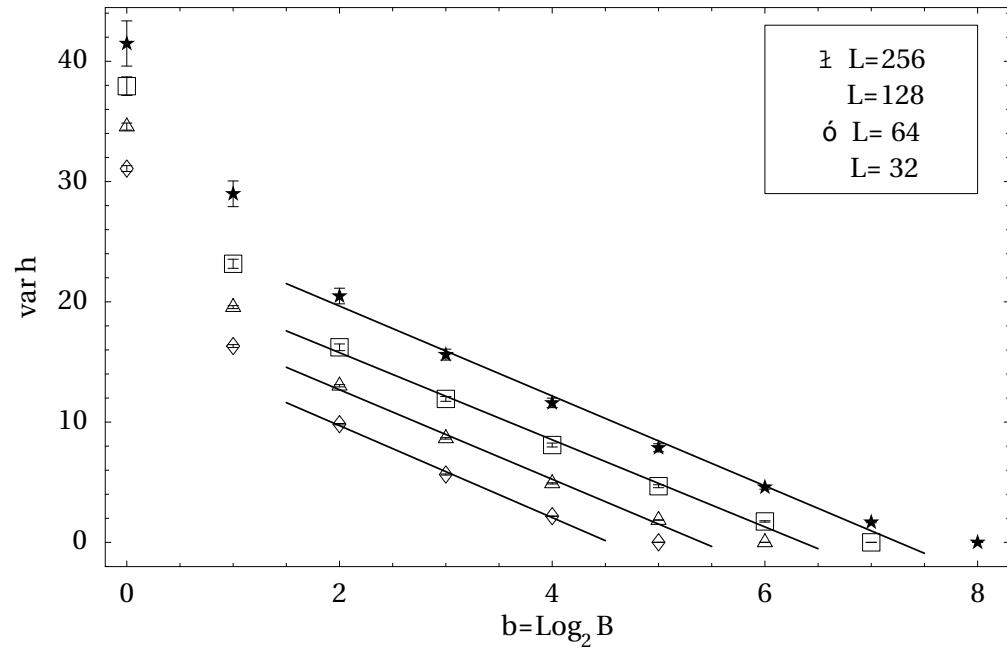


Abb. 9.7: Geschätzte Varianzen  $\text{var}(h)$  als Funktion des Logarithmus der Blockgröße  $B$  bei  $t = -0,05$  für die angegebenen Systemlängen  $L$ .

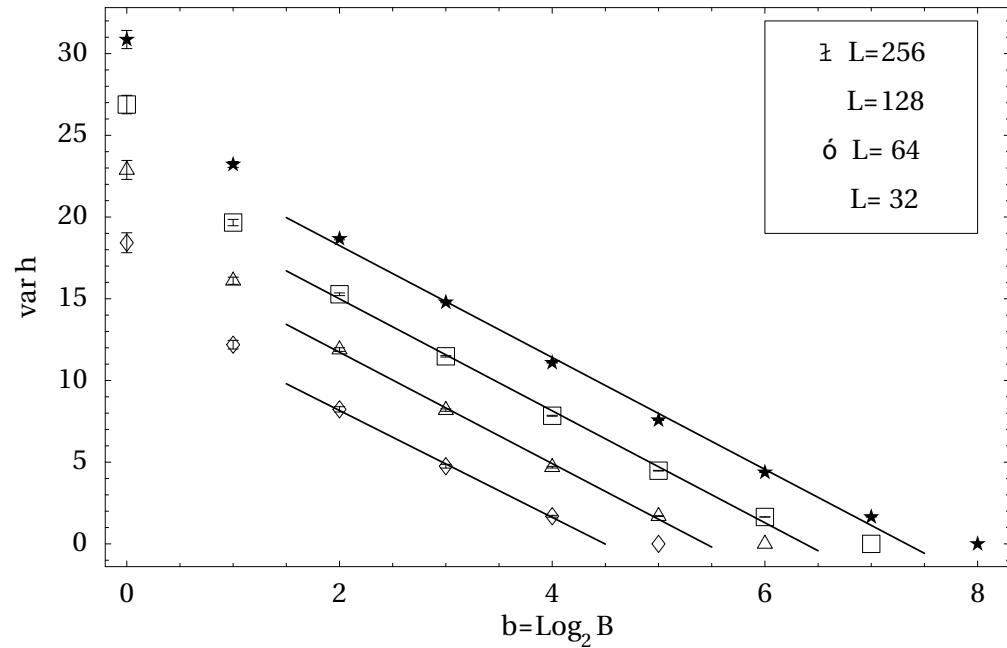


Abb. 9.8: Aus Gauß-Fits bestimmte Varianzen  $\text{var}(h)$  als Funktion des Logarithmus der Blockgröße  $B$  bei  $t = -0,05$  für die angegebenen Systemlängen  $L$ .

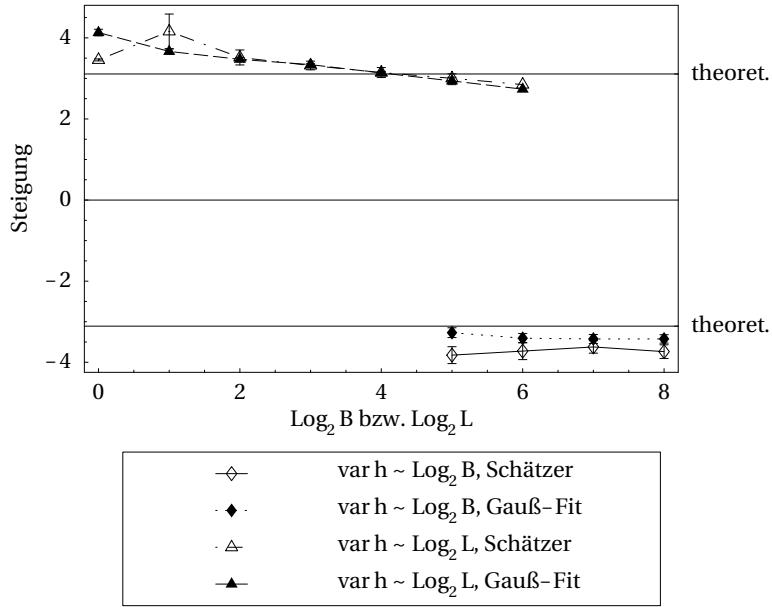


Abb. 9.9: Steigungen der linearen Fits an die Varianzen  $\text{var } h$  als Funktion von  $\log_2 L$  (oben) sowie an die Varianzen als Funktion von  $\log_2 B$  (unten), jeweils mit den theoretischen Werten aus der Kapillarwellen-Theorie.

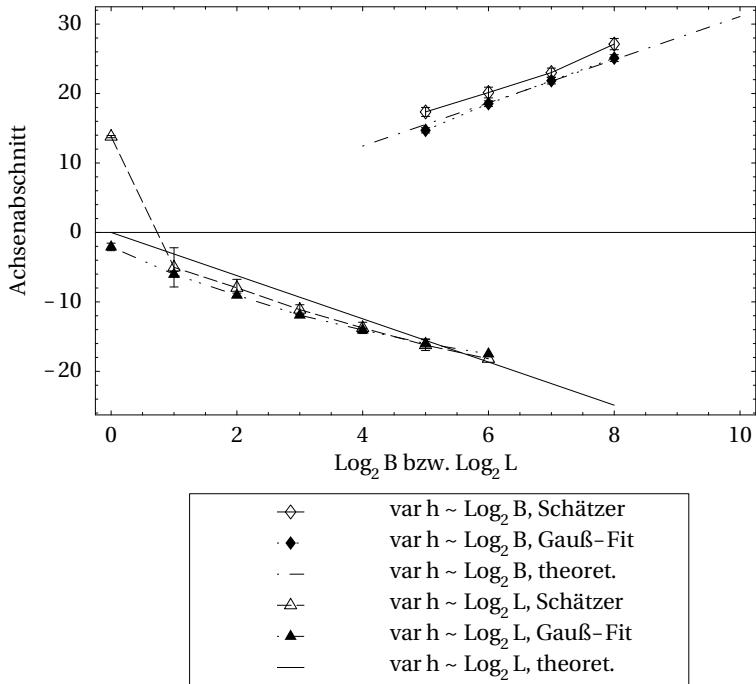


Abb. 9.10: Achsenabschnitte der linearen Fits an die Varianzen  $\text{var } h$  als Funktion von  $\log_2 L$  (oben) sowie an die Varianzen als Funktion von  $\log_2 B$  (unten), jeweils mit den theoretischen Geraden aus der Kapillarwellen-Theorie.

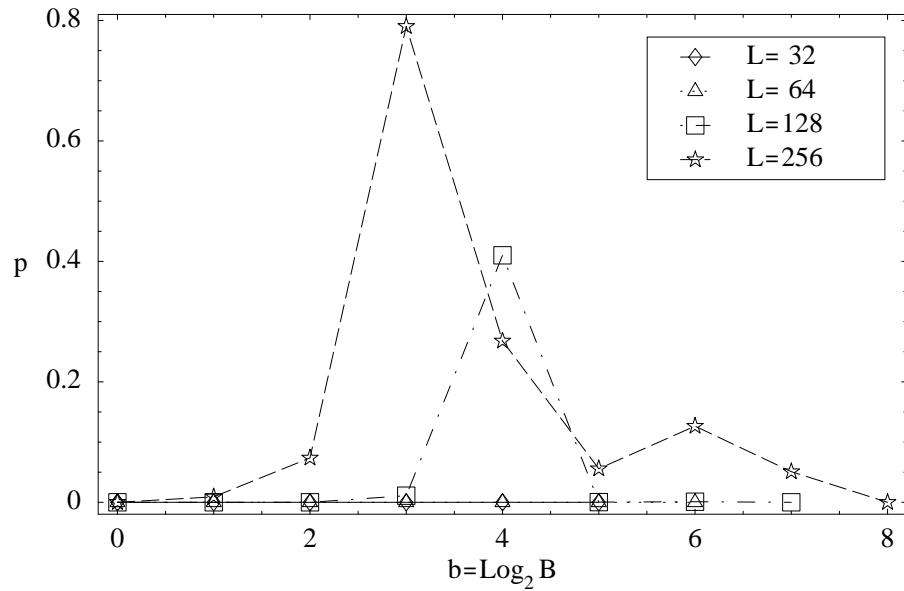


Abb. 9.11: Signifikanzlevel  $p$  des  $\chi^2$ -Tests auf Normalverteilung für die Verteilungen  $P(h)$  bei  $t = -0,05$  (Korrelationslänge  $\log_2 \xi = \log_2(1,65) = 0,72$ ).

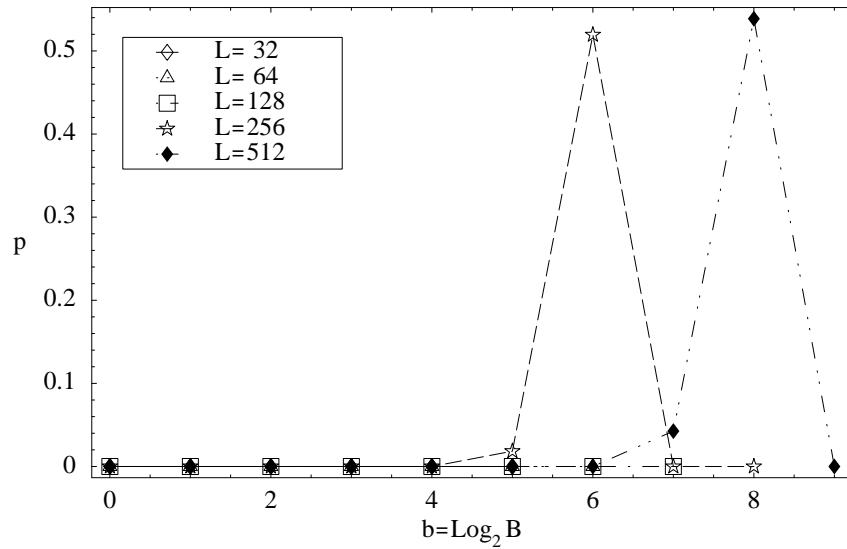


Abb. 9.12: Signifikanzlevel  $p$  des  $\chi^2$ -Tests auf Normalverteilung für die Verteilungen  $P(h)$  bei  $t = -0,01$  (Korrelationslänge  $\log_2 \xi = \log_2(4,56) = 2,12$ ).

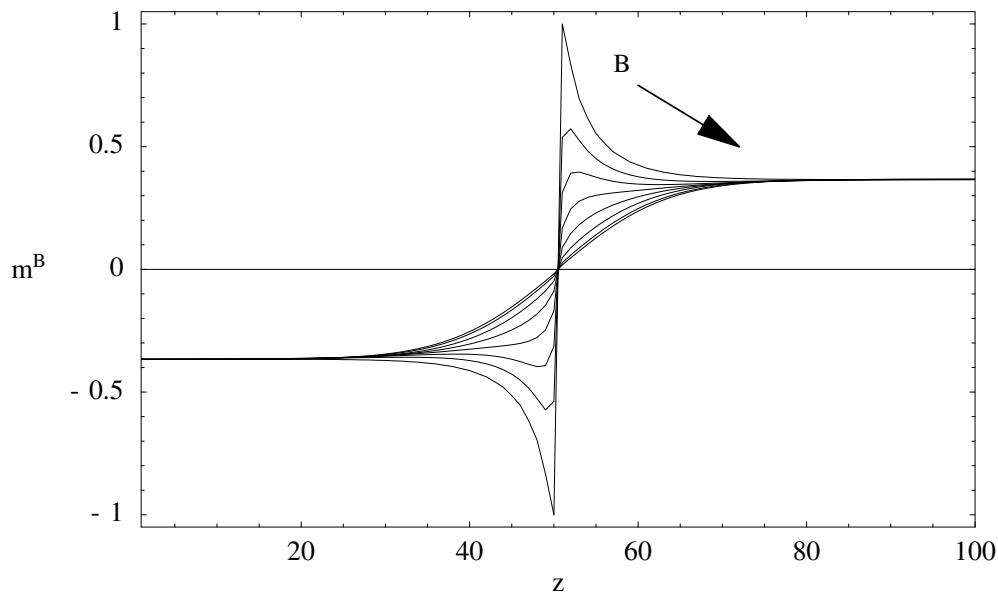


Abb. 9.13: Grenzflächenprofile  $m^B$  bei der Temperatur  $t = -0,01$  und der Systemlänge  $L = 128$  für die Blockgrößen  $B = 1, 2, 4, 8, 16, 32, 64, 128$ .

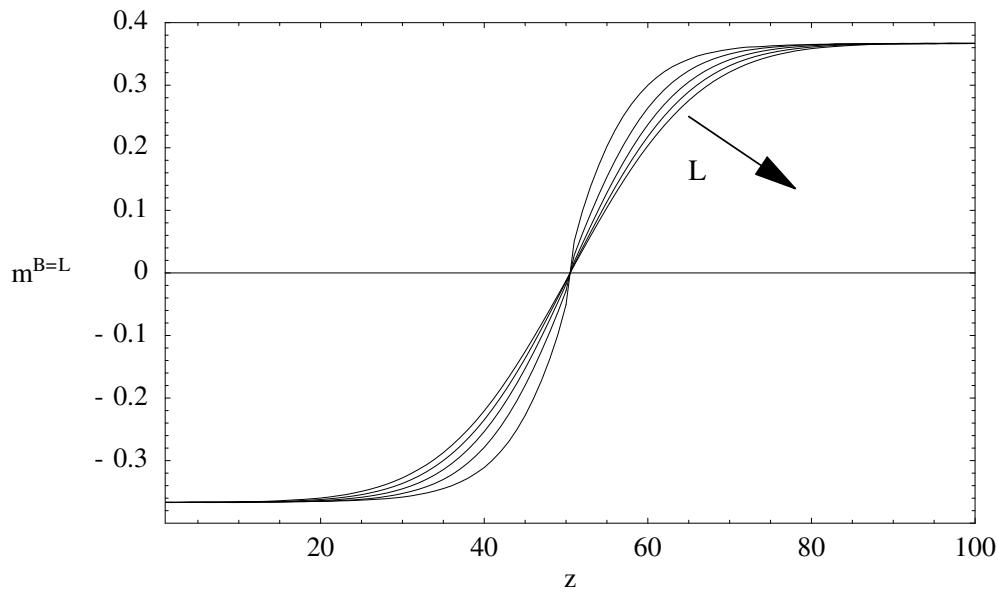


Abb. 9.14: Totale Grenzflächenprofile  $m^{B=L}$  bei der Temperatur  $t = -0,01$  für verschiedene Systemlängen  $L = 32, 64, 128, 256, 512$ .

Auch die Gesamtprofile (für  $B = L$ ) verbreitern sich mit der Systemgröße  $L$ , s. Abb. 9.14. Für die kleinste dargestellte Systemgröße  $L = 32$  erkennt man noch in der Nähe des Nulldurchgangs aufgrund der Gitter-Diskretisierung eine zu hohe (unendliche) Steigung; für größere Systemlängen  $L$  hat man glatte tanh-förmige Profile.

Qualitativ zeigen die Grenzflächen-Profile also das theoretisch erwartete Verhalten. Eine quantitative Untersuchung der Grenzflächenprofile (handelt es sich um einen Tangens hyperbolicus, um eine Fehlerfunktion, oder um eine andere Funktion?) ist jedoch schwierig. Deshalb werden die Aussagen der betrachteten Theorien statt dessen anhand der Profil-Dicken untersucht.

## 9.4 Dicke der Grenzflächen

In diesem Abschnitt werden die in den Monte-Carlo-Simulationen erhaltenen Dicken der Grenzflächen diskutiert. Die theoretische Vorhersage in der Faltsungs Näherung ist (6.12)

$$w^2 = c_{\text{intr}} \xi^2 + A_{\text{KW}} \log_2 \frac{B}{B_{\text{KW}}}$$

mit den von der genauen Definition der Dicke abhängigen Koeffizienten  $c_{\text{intr}}$  und  $A_{\text{KW}}$  aus (6.3), (6.8), (6.12). Dabei spielt die Blockgröße  $B$  die Rolle der Systemgröße  $L$ , da alle Fluktuationen mit Wellenlänge  $\lambda > B$  abgeschnitten werden (vgl. Gl. (6.16)). Allerdings ist bei dieser Identifizierung zu beachten, dass unterschiedliche Randbedingungen gelten: Im Fall  $B = L$  hat man periodische Randbedingungen, im Fall  $B < L$  sind die Randbedingungen unklar; sie werden vorgegeben durch die jeweilige System-Konfiguration.

### 9.4.1 Dicken bei $t = -0,01$

Das Verhalten der Dicken in Abhängigkeit von der Blockgröße bei der Temperatur  $t = -0,01$  zeigen Abb. 9.15 (für die Dicke definiert über das Gradienten-Quadrat) und 9.16 (für die Dicke definiert über den Gradienten). Folgende Effekte sind erkennbar:

- Zu einer Blockgröße  $B$  gehört eine (von der Systemlänge  $L$  unabhängige) **Dicke**  $w^2$ , die also **charakteristisch** für die Grenzfläche auf dieser **Größenskala** ist. Abweichungen (zu kleine Dicken) beruhen auf zu kleinen Systemgrößen; für große  $L$  konvergiert die Dicke auf den Abbildungen gut erkennbar gegen den für die jeweilige Blockgröße  $B$  charakteristischen Wert.
- Wie erwartet steigen die Dicken mit der Blockgröße an.
- Für kleine Blockgrößen bleibt die Dicke nahezu konstant. Man könnte dies für den intrinsischen Bereich halten, in dem die Mean-field-Theorie zutrifft. Die Dicke ist jedoch erheblich kleiner als die zu erwartende Mean-field-Dicke, vgl. die eingezeichneten theoretischen Mean-field-Dicken  $w_{\text{intr}}^2$ .

Würde man in der Mean-field-Theorie höhere Loop-Ordnungen mitnehmen, so würde sich dieser theoretische Wert  $w_{\text{intr}}^2$  noch weiter vergrößern. Bei den bei **kleinen Blockgrößen** beobachteten Dicken handelt es sich also um eine **durch Gitterartefakte bestimmte Dicke**, die durch den unphysikalischen Peak im Gradienten bzw. Gradienten-Quadrat bei kleinen Blockgrößen verursacht wird (vgl. Abschnitt 7.6).

- Bereits für Blockgrößen  $B$  in der Größenordnung der Korrelationslänge  $\xi$  beginnen die Dicken anzusteigen. Ein **intrinsisches Verhalten** konstanter Mean-field-Dicke tritt nicht auf. Nimmt man die Blockgröße, bei der die Dicke die theoretische Mean-field-Dicke erreicht, als Gültigkeitsbereich der Mean-field-Theorie an, so kann man den intrinsischen Cutoff aus den Gradient-Quadrat-Dicken abschätzen zu

$$B_{\text{intr}} \sim 2^{3/2}\xi \sim 3\xi$$

und aus den Gradient-Dicken zu

$$B_{\text{intr}} \sim 2^3\xi \sim 8\xi.$$

- Bei Blockgrößen einiger Korrelationslängen zeigen die Dicken einen **linearen Anstieg** mit dem Logarithmus der Blockgröße  $b = \log_2 B$ , wie nach der Kapillarwellen-Theorie zu erwarten.
- Das **Abknicken** der Geraden **für  $B = L$**  ist ein Randeffekt, der von den unterschiedlichen Randbedingungen für  $B = L$  und  $B < L$  herrührt. Verändert man die Randbedingungen für  $B = L$  (geht man z. B. zu freien Randbedingungen über), so verändert sich dieses Verhalten (stärkeres Abknicken).

Abb. 9.17 und 9.18 zeigen lineare Fits an die linearen Bereiche der Dicken sowie zum Vergleich die um einen Offset verschobene theoretische Dicke

$$w_{\text{theo}}^2 + A_{\text{KW}} \log_2 B_{\text{KW}} = c_{\text{intr}} \xi^2 + A_{\text{KW}} \log_2 B.$$

Dabei wurden sowohl die Dicken als Funktion der Blockgröße als auch die totalen Dicken (für  $B = L$ ) als Funktion der Systemlänge  $L$  angefittet. Für größere Systemgrößen  $L$  sowie für die totalen Dicken bei  $B = L$  gleichen sich die Geradensteigungen immer mehr der Steigung der theoretischen Geraden an. Dies erkennt man deutlich beim Vergleich der ermittelten Steigungen mit der theoretischen Steigung

$$A_{\text{KW}} = \begin{cases} 11,8(4) & \text{für } p \sim c'^2 \\ 23,7(8) & \text{für } p \sim c' \end{cases}$$

in Abb. 9.19 und 9.20. Die gemessenen Steigungen liegen in der richtigen Größenordnung, stimmen aber nur für die aus den totalen Gradient-Dicken ermittelte Steigung wirklich mit dem theoretischen Wert überein. Interessanterweise sind die aus den Gradient-Quadrat-Dicken ermittelten Steigungen zu groß, während die aus den Gradient-Dicken ermittelten Steigungen zu klein sind. Weder

eine Korrektur zu den Werten der Oberflächenspannung (die nach (2.9) berechnet wurden) noch die Verbesserung der Faltungsnäherung (die in einer anderen Steigung als  $A_{\text{KW}}$  resultieren würde) können also eine Erklärung der Differenz liefern. Vermutlich sind die Systemgrößen noch zu klein, um den „richtigen“ Wert der Steigung zu erhalten, was man auch daran erkennt, dass die Steigungen für verschiedene Systemgrößen nicht konstant sind, sondern noch (gegen den theoretischen Wert?) konvergieren.

Die Achsenabschnitte der linearen Fits aus Abb. 9.17 und 9.18 sollten

$$\text{Achsenabschnitt} = w_{\text{intr}}^2 - A_{\text{KW}} \log_2 B_{\text{KW}}$$

sein, so dass aus den Achsenabschnitten der Kapillarwellen-Cutoff  $B_{\text{KW}}$  abgeschätzt werden kann:

$$B_{\text{KW}} = 2^{(w_{\text{intr}}^2 - \text{Achsenabschnitt})/A_{\text{KW}}}$$

Wegen der exponentiellen Abhängigkeit von den Parametern  $w_{\text{intr}}^2$ ,  $A_{\text{KW}}$  sowie dem geschätzten Achsenabschnitt haftet dieser Abschätzung jedoch eine große Unsicherheit an; je nachdem, welche Werte man für die Parameter wählt (theoretisch berechnete, aus Messdaten auf verschiedene Weisen geschätzte), erhält man um Größenordnungen verschiedene Ergebnisse für den Kapillarwellen-Cutoff  $B_{\text{KW}}$ . Insofern ist die in Abschnitt 9.2.3 verwendete Methode zur Abschätzung von  $B_{\text{KW}}$  vertrauenswürdiger. (Dort wurde  $B_{\text{KW}}$  abgeschätzt zu  $B_{\text{KW}} \sim (5 - 7)\xi$ , s. Gl. (9.1).)

Der Achsenabschnitt für die Gradient-Quadrat-Dicken kann aus Abb. 9.21 abgelesen werden zu

$$\text{Achsenabschnitt} \approx -55,$$

woraus man mit den theoretischen Werten für  $w_{\text{intr}}^2$  und  $A_{\text{KW}}$  errechnet:

$$B_{\text{KW}} \approx 27\xi,$$

ein unrealistisch hoher Wert. Verwendet man hingegen statt der theoretischen intrinsischen Dicke  $w_{\text{intr}}^2 = 26,8$  die gemessene Dicke  $w^2 \approx 0,5$  bei  $B \approx \xi$  aus Abb. 9.15, so ergibt sich der realistischere Wert

$$B_{\text{KW}} \approx 6\xi.$$

Für den Achsenabschnitt der Gradient-Dicken erhält man aus Abb. 9.22

$$\text{Achsenabschnitt} \approx 0,$$

für die Dicken als Funktion der Blockgröße  $B$  und

$$\text{Achsenabschnitt} \approx -46,$$

für die totalen Dicken bei  $B = L$ . Man erhält unter Verwendung der theoretischen Breite  $w_{\text{intr}}^2 = 68,4$  bzw. dem Wert der Dicke  $w^2 \approx 35$  bei  $B = \xi$  in Abb. 9.16 realistische Werte zwischen

$$B_{\text{KW}} \sim (2 - 6)\xi.$$

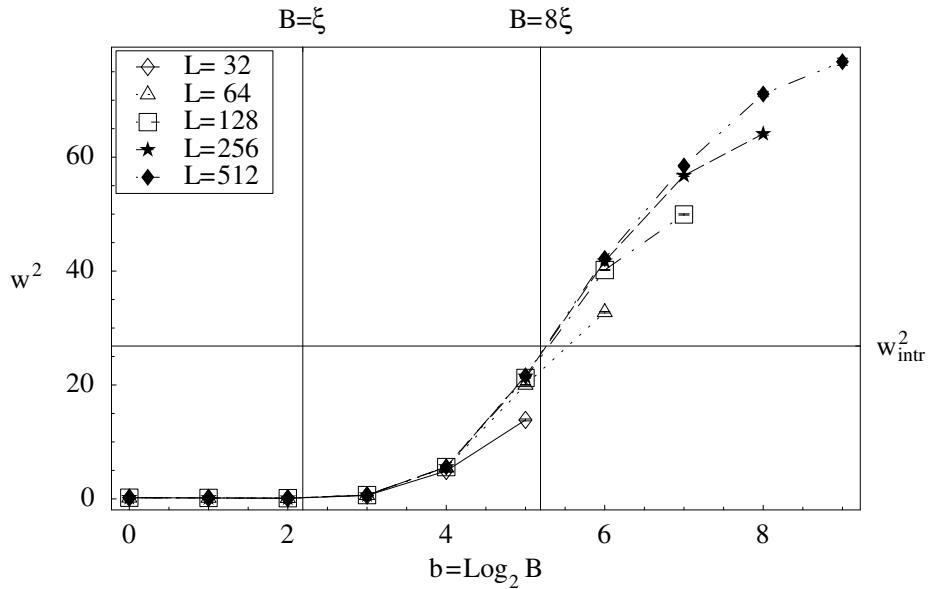


Abb. 9.15: Dicken  $w^2$  nach Definition über  $p \sim c'^2$  bei der Temperatur  $t = -0,01$ . Eingezeichnet sind die Korrelationslänge  $\xi$  sowie die Blockgröße  $8\xi$ , bei der die Dicke gleich der theoretischen Dicke  $w_{\text{intr}}^2$  ist.

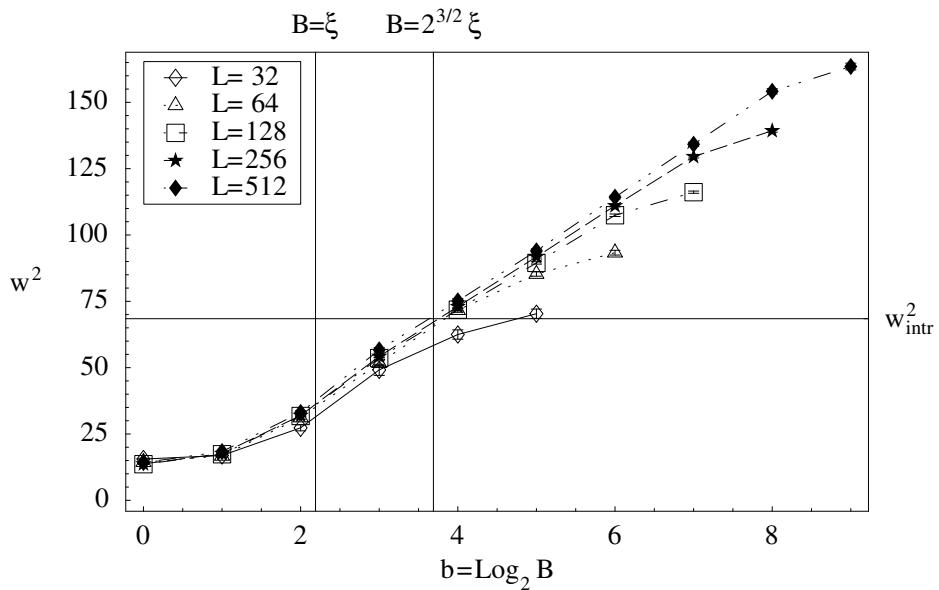


Abb. 9.16: Dicken  $w^2$  nach Definition über  $p \sim c'$  bei der Temperatur  $t = -0,01$ . Eingezeichnet sind die Korrelationslänge  $\xi$  sowie die Blockgröße  $2^{3/2}\xi$ , bei der die Dicke gleich der theoretischen Dicke  $w_{\text{intr}}^2$  ist.

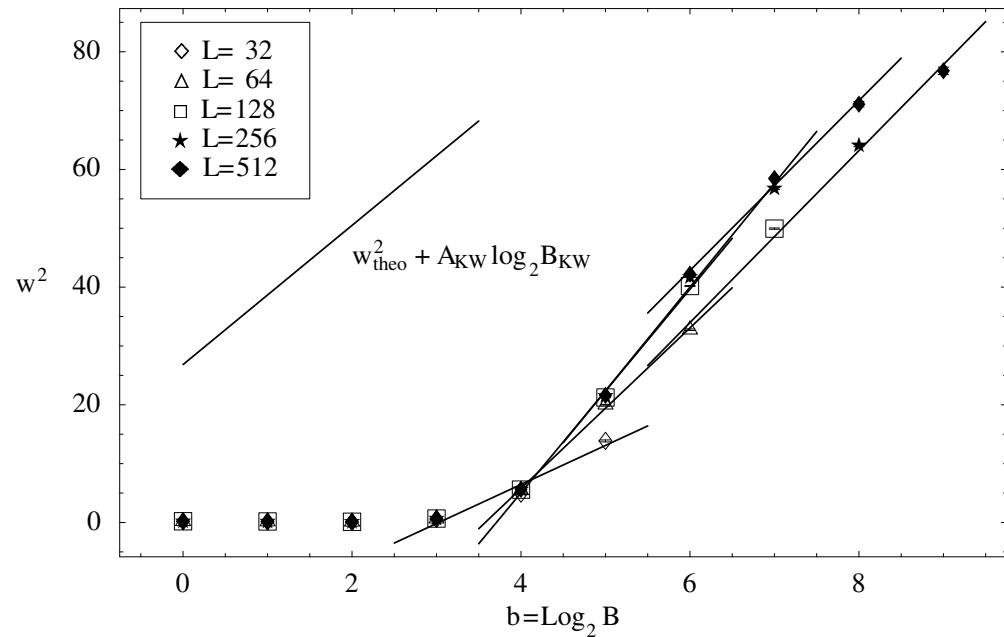


Abb. 9.17: Lineare Fits an die Dicken  $w^2$  (Gradient-Quadrat-Definition) aus Abb. 9.15, zusammen mit der um den Offset  $A_{\text{KW}} \log_2 B_{\text{KW}}$  verschobenen theoretischen Dicke  $w_{\text{theo}}^2$ .

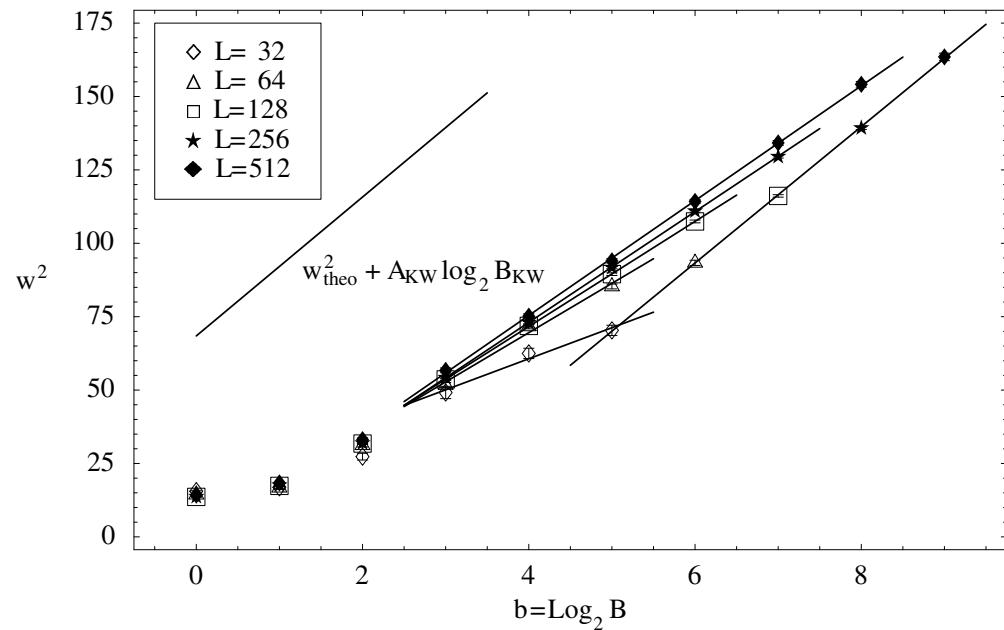


Abb. 9.18: Lineare Fits an die Dicken  $w^2$  (Gradient-Definition) aus Abb. 9.16, zusammen mit der um den Offset  $A_{\text{KW}} \log_2 B_{\text{KW}}$  verschobenen theoretischen Dicke  $w_{\text{theo}}^2$ .

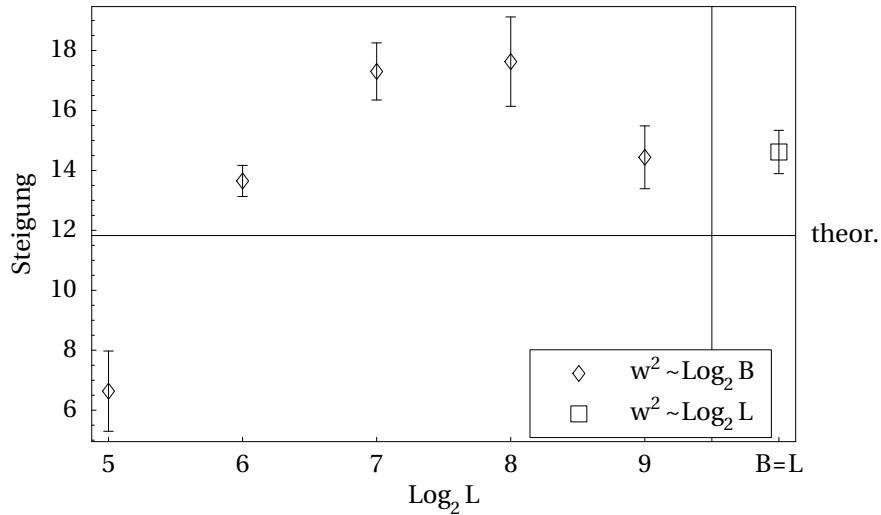


Abb. 9.19: Steigungen der linearen Fits aus Abb. 9.17 an die Gradient-Quadrat-Dicken als Funktion von  $\log_2 B$  bzw.  $\log_2 L$ , zusammen mit dem theoretischen Wert  $A_{\text{KW}}$ .

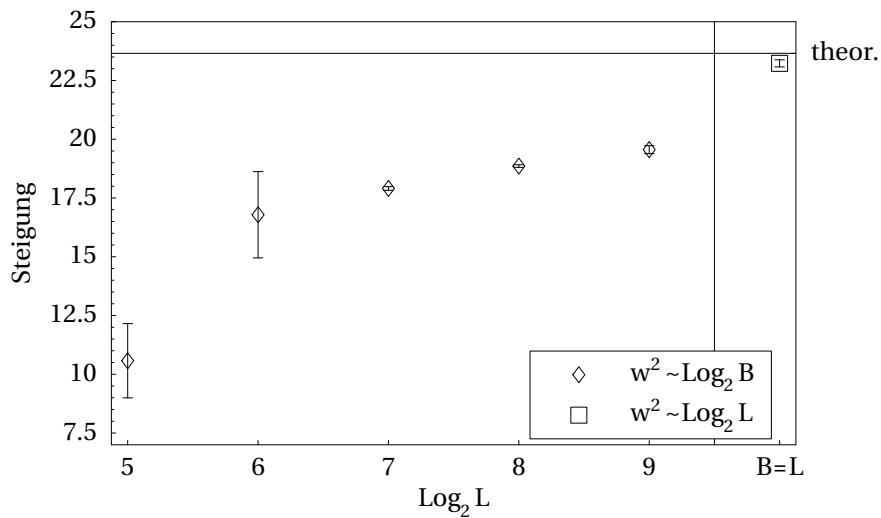


Abb. 9.20: Steigungen der linearen Fits aus Abb. 9.18 an die Gradient-Dicken als Funktion von  $\log_2 B$  bzw.  $\log_2 L$ , zusammen mit dem theoretischen Wert  $A_{\text{KW}}$ .

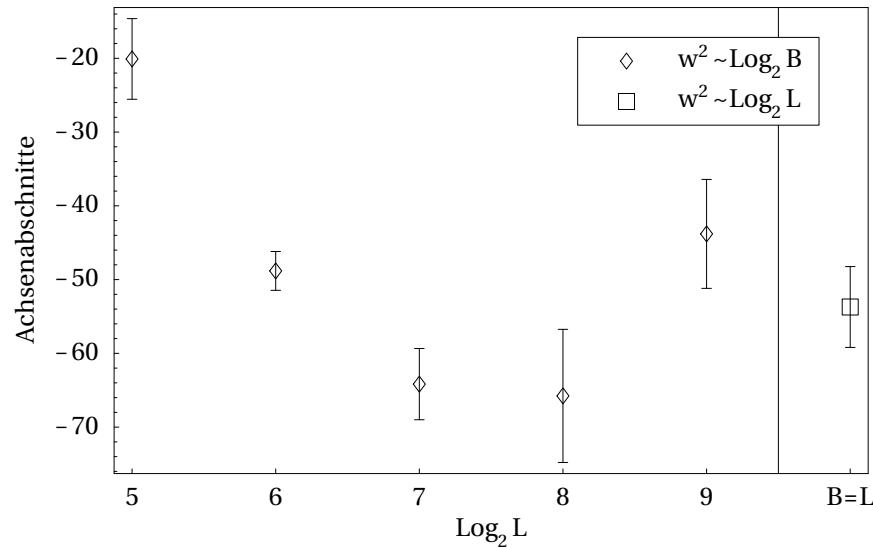


Abb. 9.21: Achsenabschnitte der linearen Fits aus Abb. 9.17 an die Gradient-Quadrat-Dicken als Funktion von  $\log_2 B$  bzw.  $\log_2 L$ .

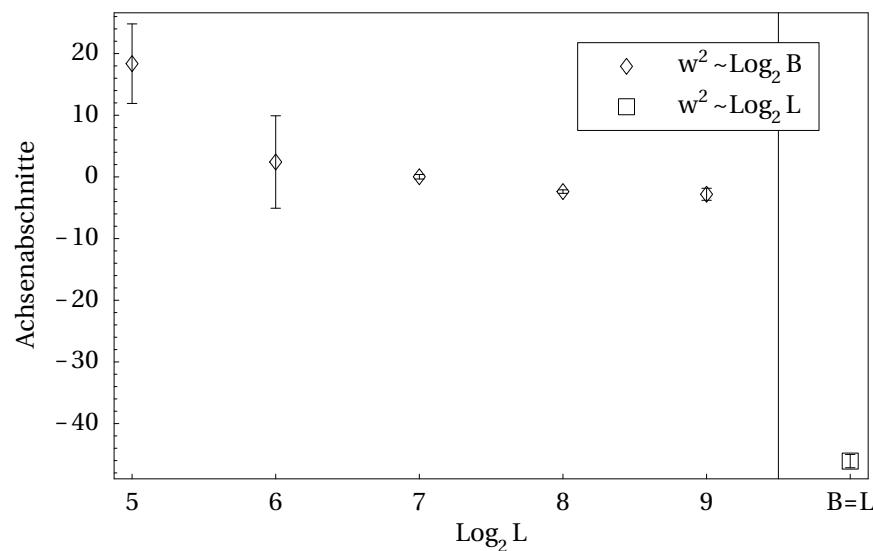


Abb. 9.22: Achsenabschnitte der linearen Fits aus Abb. 9.18 an die Gradient-Dicken als Funktion von  $\log_2 B$  bzw.  $\log_2 L$ .

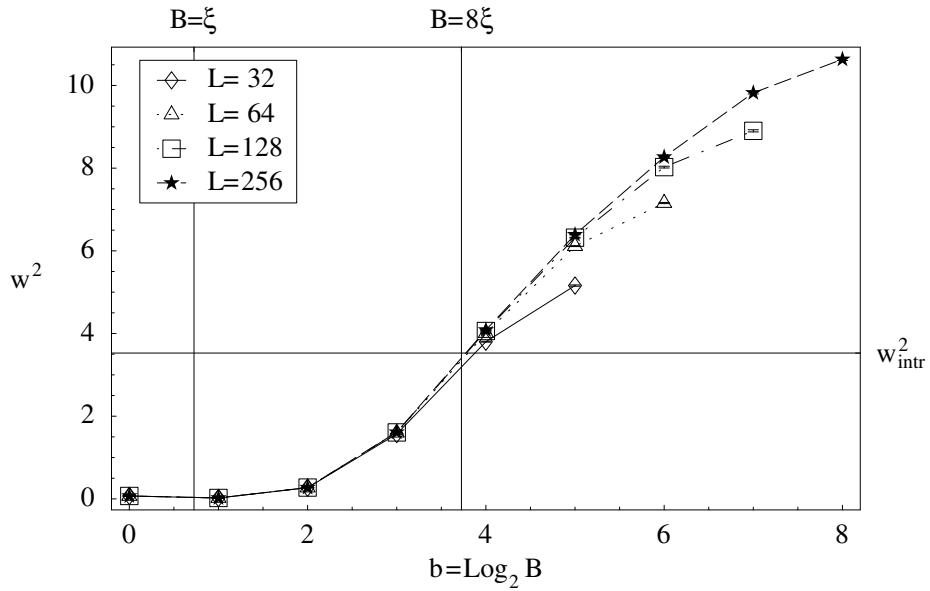


Abb. 9.23: Gradient-Quadrat-Dicken  $w^2$  bei der Temperatur  $t = -0,05$ . Eingezeichnet sind die Korrelationslänge  $\xi$  sowie die Blockgröße  $8\xi$ , bei der die Dicke gleich der theoretischen Dicke  $w_{\text{intr}}^2$  ist.

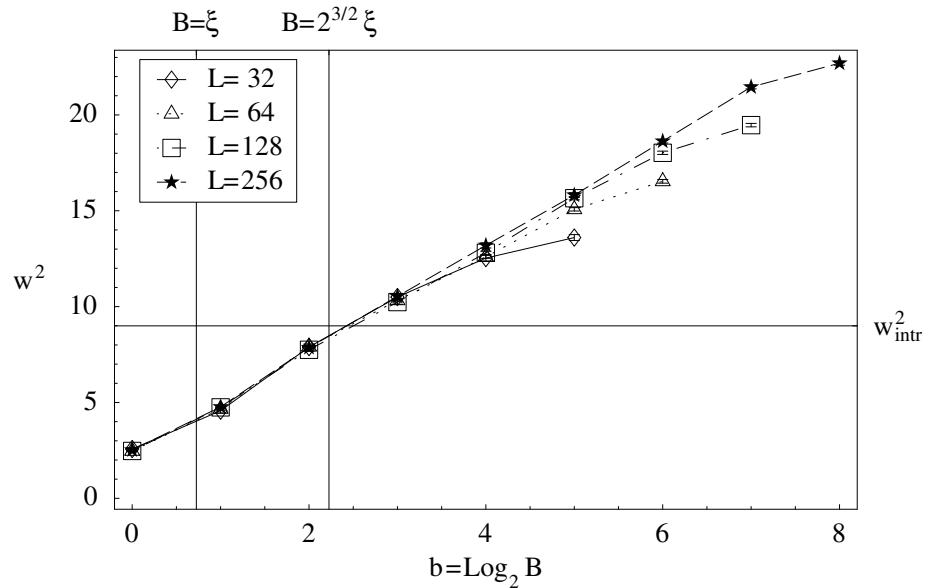


Abb. 9.24: Gradient-Dicken  $w^2$  bei der Temperatur  $t = -0,05$ . Eingezeichnet sind die Korrelationslänge  $\xi$  sowie die Blockgröße  $2^{3/2}\xi$ , bei der die Dicke gleich der theoretischen Dicke  $w_{\text{intr}}^2$  ist.

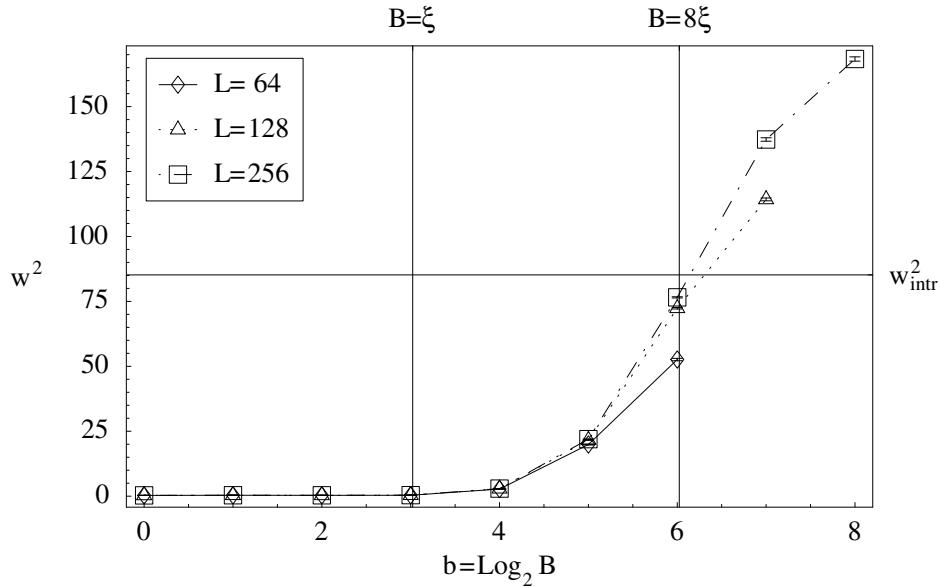


Abb. 9.25: Gradient-Quadrat-Dicken  $w^2$  bei der Temperatur  $t = -0,004$ . Eingezeichnet sind die Korrelationslänge  $\xi$  sowie die Blockgröße  $8\xi$ , bei der die Dicke gleich der theoretischen Dicke  $w_{\text{intr}}^2$  ist.

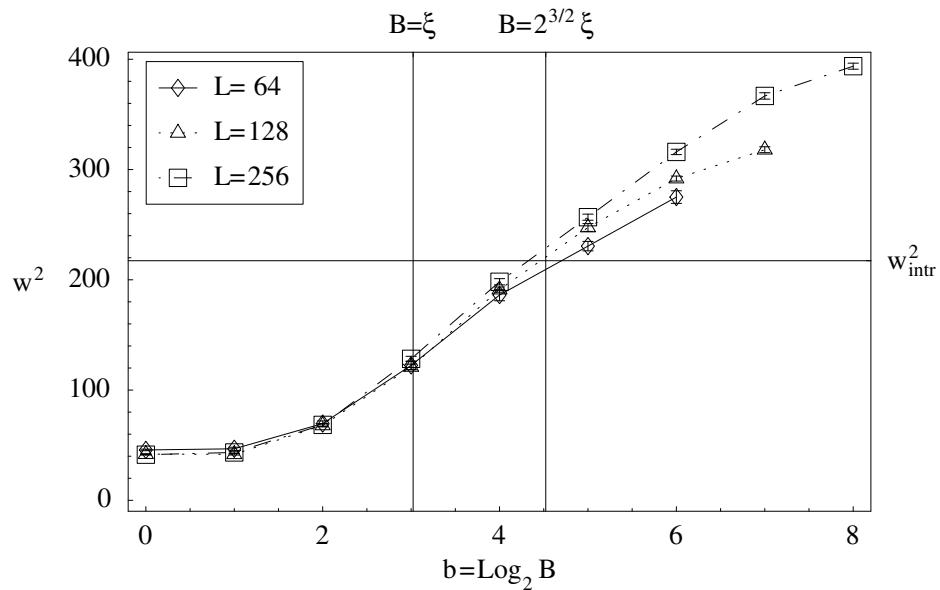


Abb. 9.26: Gradient-Dicken  $w^2$  bei der Temperatur  $t = -0,004$ . Eingezeichnet sind die Korrelationslänge  $\xi$  sowie die Blockgröße  $2^{3/2}\xi$ , bei der die Dicke gleich der theoretischen Dicke  $w_{\text{intr}}^2$  ist.

### 9.4.2 Dicken bei $t = -0,05$ und $t = -0,004$

Die Ergebnisse der Monte-Carlo-Simulation für die Dicken bei den Temperaturen  $t = -0,05$  und  $t = -0,004$  sind in den Abb. 9.23–9.26 gezeigt. Das Verhalten ist qualitativ und quantitativ ähnlich wie bei den Dicken für  $t = -0,01$ . Ursache dafür ist natürlich, dass sich nach Abschnitt 6.1 die Dicken in Einheiten der doppelten Korrelationslänge  $\xi$  universell verhalten. Deshalb werden im Folgenden nur diese universellen Dicken diskutiert.

### 9.4.3 Dicken in universeller Form

Nach Abschnitt 6.1 sind die Dicken in Einheiten der doppelten Korrelationslänge (gekennzeichnet durch einen Zirkumflex) unabhängig von der Temperatur:

$$\hat{w}^2 = \left( \frac{w}{2\xi} \right)^2 = \frac{c_{\text{intr}}}{4} + \hat{A}_{\text{KW}} \log_2 \frac{\hat{B}}{\hat{B}_{\text{KW}}}$$

mit

$$\frac{c_{\text{intr}}}{4} = \begin{cases} \frac{\pi^2 - 6}{12} &= 0,322 \quad \text{für } p \sim c'^2 \\ \frac{\pi^2}{12} &= 0,822 \quad \text{für } p \sim c' \end{cases}$$

und

$$\hat{A}_{\text{KW}} = \frac{c_{\text{KW}} \ln 2}{8\pi R} = \begin{cases} 0,142(4) & \text{für } p \sim c'^2 \\ 0,284(9) & \text{für } p \sim c' \end{cases} \quad (9.2)$$

Dies ist in der Tat der Fall, wie die Abb. 9.27 und 9.28 zeigen. Die Dicken  $\hat{w}^2$  in Einheiten der doppelten Korrelationslänge liegen recht gut auf einer universellen Kurve, die dasselbe Verhalten zeigt, wie es bereits in Abschnitt 9.4.1 diskutiert wurde:

- Zu einer Blockgröße  $B$  gehört eine charakteristische Dicke  $w^2$ .
- Die Dicken steigen mit der Block- bzw. Systemgröße an.
- Für kleine Blockgrößen bleibt die Dicke nahezu konstant auf einem durch Gitterartefakte verursachten Wert, der wesentlich kleiner ist als die theoretische intrinsische Dicke  $\hat{w}_{\text{intr}}^2$ . Nimmt man die Blockgröße, bei der die Dicke die theoretische Mean-field-Dicke erreicht, als Gültigkeitsbereich der Mean-field-Theorie an, so kann man den intrinsischen Cutoff  $B_{\text{intr}}$  abschätzen zu

$$B_{\text{intr}} = \begin{cases} 2^3 \xi &= 8 \xi \quad \text{für } p \sim c'^2 \\ 2^{3/2} \xi &= 2,8 \xi \quad \text{für } p \sim c' \end{cases}$$

- Bereits bei Blockgrößen einiger Korrelationslängen beginnen die Dicken-Quadrat linear anzusteigen, wie nach der Kapillarwellen-Theorie zu erwarten.

- Für  $B = L$  knicken die Geraden aufgrund unterschiedlicher Randbedingungen für  $B < L$  und  $B = L$  ab.

Abb. 9.29 und 9.30 zeigen lineare Fits an den linearen Bereich der Dicken  $\hat{w}^2$  als Funktion der Blockgröße  $B$ ; Abb. 9.31 und 9.32 lineare Fits an die totalen Dicken  $\hat{w}^2$  für  $B = L$ . Die Gleichungen der linearen Fits sind:

$$\begin{aligned} p \sim c'^2, \quad B < L \quad (\text{Abb. 9.29}) : \quad \hat{w}^2 &= 0,07(11) + 0,16(2) \log_2 \hat{B} \\ p \sim c'^2, \quad B = L \quad (\text{Abb. 9.31}) : \quad \hat{w}^2 &= 0,02(3) + 0,16(3) \log_2 \hat{L} \\ p \sim c', \quad B < L \quad (\text{Abb. 9.30}) : \quad \hat{w}^2 &= 0,57(1) + 0,26(3) \log_2 \hat{B} \\ p \sim c', \quad B = L \quad (\text{Abb. 9.32}) : \quad \hat{w}^2 &= 0,30(4) + 0,28(1) \log_2 \hat{L} \end{aligned} \quad (9.3)$$

Die erhaltenen Steigungen sind innerhalb der Fehlertoleranzen alle identisch mit dem theoretischen Wert  $\hat{A}_{\text{KW}}$  aus (9.2).

Die Achsenabschnitte

$$\text{Achsenabschnitt} = \frac{c_{\text{intr}}}{4} - \hat{A}_{\text{KW}} \log_2 \hat{B}_{\text{KW}}$$

können zur Abschätzung des Kapillarwellen-Cutoffs benutzt werden, wobei das Ergebnis aufgrund der exponentiellen Abhängigkeit

$$\hat{B}_{\text{KW}} = 2^{(\frac{c_{\text{intr}}}{4} - \text{Achsenabschnitt})/\hat{A}_{\text{KW}}}$$

stark mit den verwendeten Parametern variiert. Man erhält Werte zwischen

$$\boxed{B_{\text{KW}} \approx (1 - 9)\xi},$$

die durchaus realistisch erscheinen.

Insgesamt erhält man also durch die Transformation auf die universellen Dicken in Einheiten der doppelten Korrelationslänge deutlich besser mit der Theorie übereinstimmende Werte für die Steigung der Dicken im Kapillarwellen-Bereich (d. h. im Endeffekt gute Werte der universellen Konstanten  $R = \sigma\xi^2$ ) und realistische Werte für den Kapillarwellen-Cutoff  $B_{\text{KW}}$ . Ursache dieser Verbesserung ist die bessere Statistik im Bereich großer logarithmierter Block- bzw. Systemgrößen aufgrund des Zusammenfassens von Werten zu verschiedenen Temperaturen.

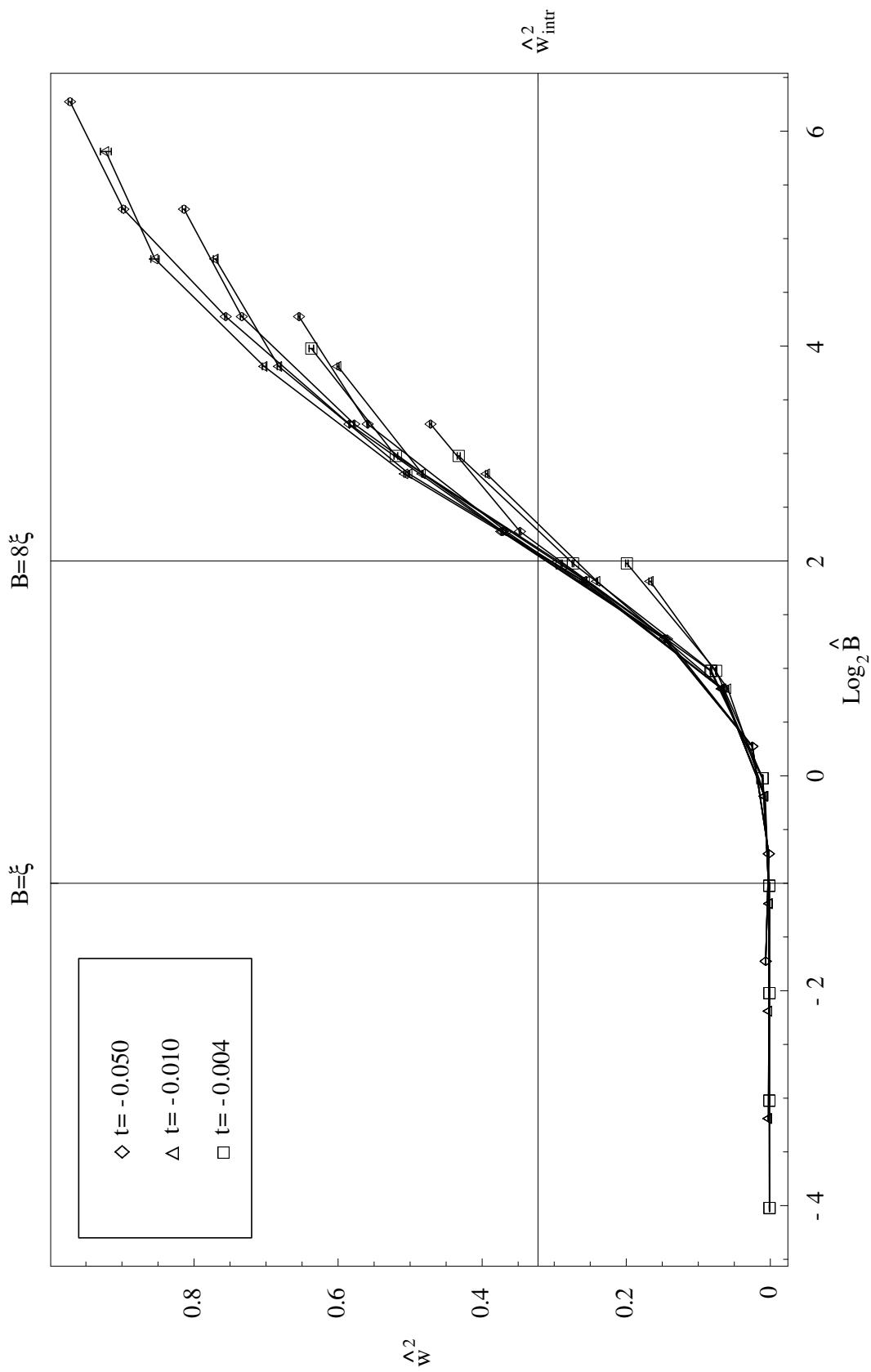


Abb. 9.27: Gradient-Quadrat-Dicken  $\hat{w}^2$  in universeller Form. Für jede Temperatur sind die Dicken für alle verwendeten Systemlängen  $L$  mit demselben Symbol eingetragen.

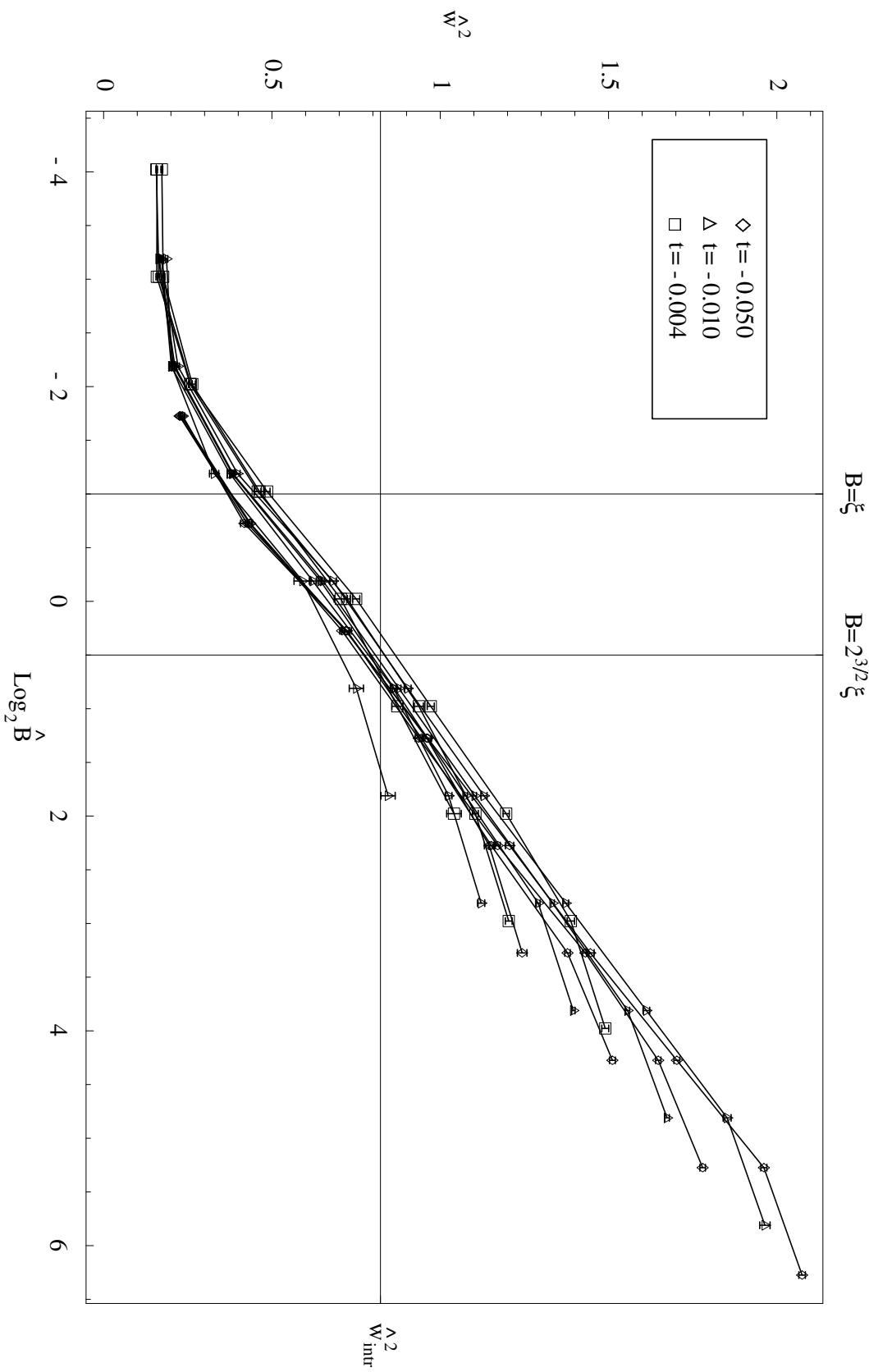


Abb. 9.28: Gradient-Dicken  $\hat{w}^2$  in universeller Form. Für jede Temperatur sind die Dicken für alle verwendeten Systemlängen L mit demselben Symbol eingetragen.

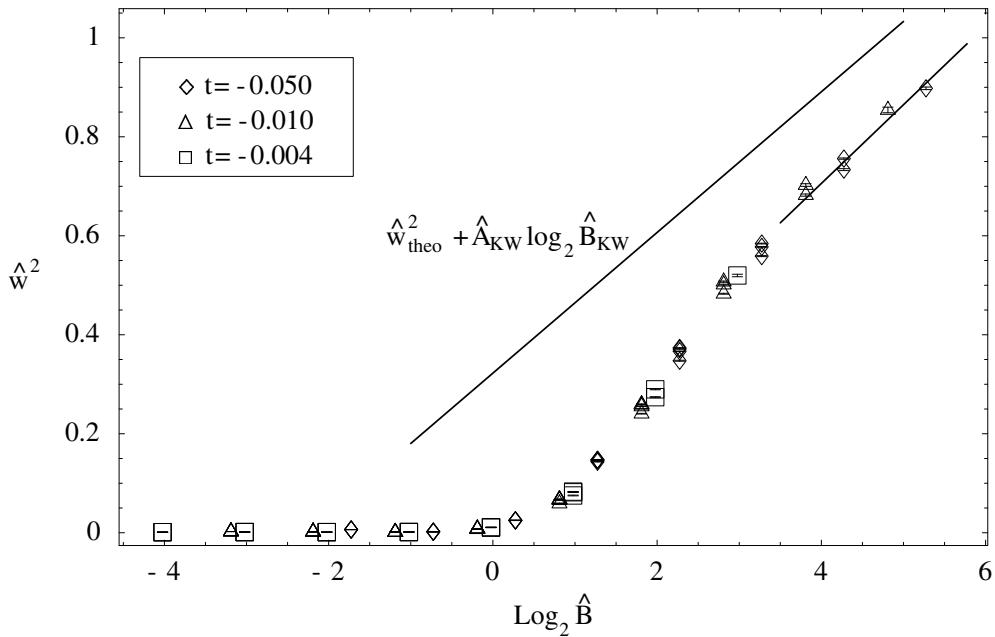


Abb. 9.29: Linearer Fit an die universellen Gradient-Quadrat-Dicken aus Abb. 9.27 ohne die totalen Dicken bei  $B = L$ , zusammen mit der mit einem Offset versehenen theoretischen Geraden  $\hat{w}_{\text{theo}}^2 + \hat{A}_{\text{KW}} \log_2 \hat{B}_{\text{KW}}$ .

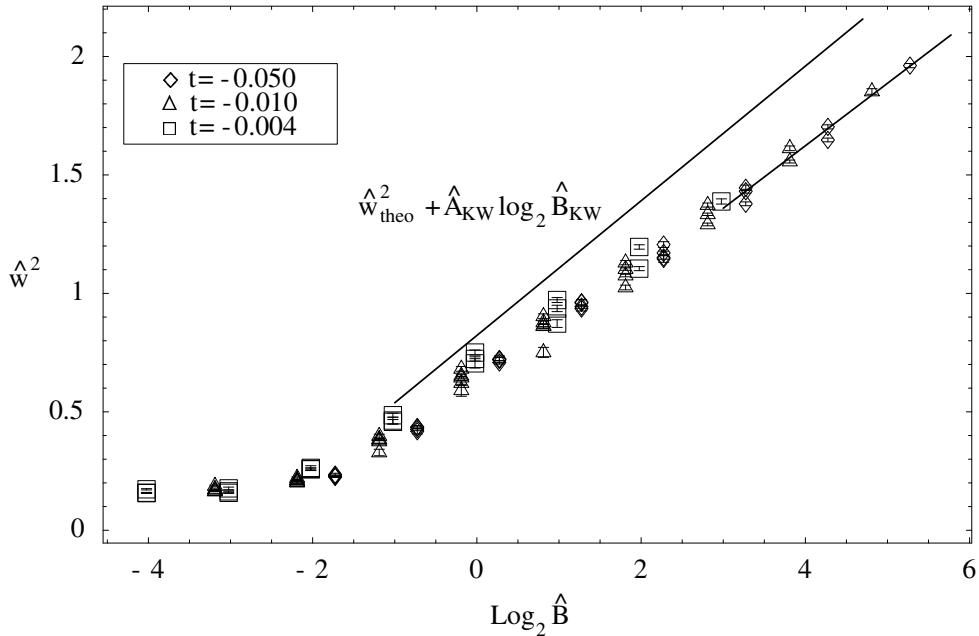


Abb. 9.30: Linearer Fit an die universellen Gradient-Dicken aus Abb. 9.28 ohne die totalen Dicken bei  $B = L$ , zusammen mit der mit einem Offset versehenen theoretischen Geraden  $\hat{w}_{\text{theo}}^2 + \hat{A}_{\text{KW}} \log_2 \hat{B}_{\text{KW}}$ .

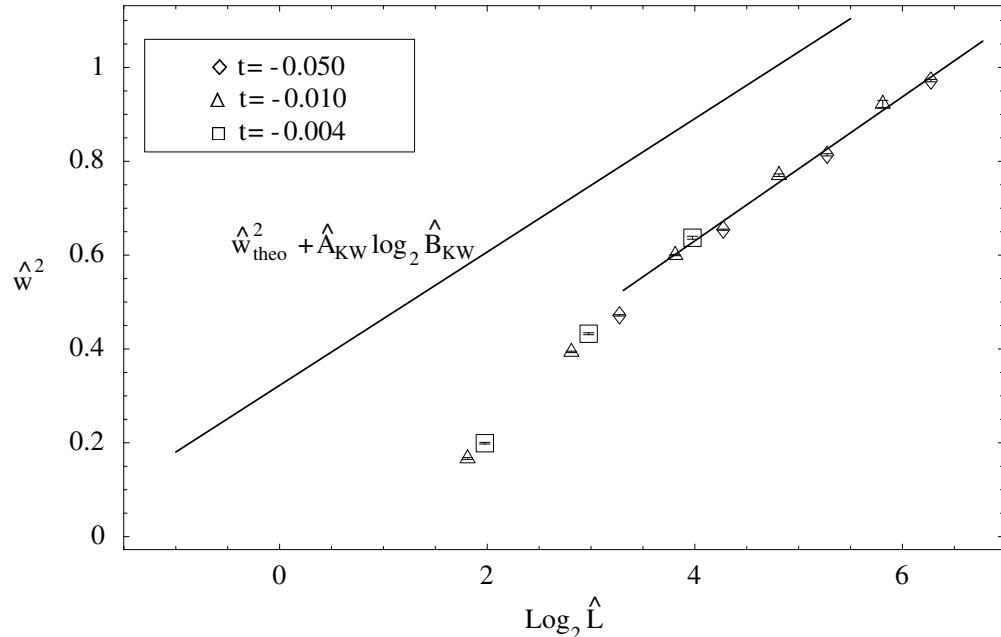


Abb. 9.31: Linearer Fit an die universellen totalen Gradient-Quadrat-Dicken (für  $B = L$ ) aus Abb. 9.27, zusammen mit der mit einem Offset versehenen theoretischen Geraden  $\hat{w}_{\text{theo}}^2 + \hat{A}_{\text{KW}} \log_2 \hat{B}_{\text{KW}}$ .

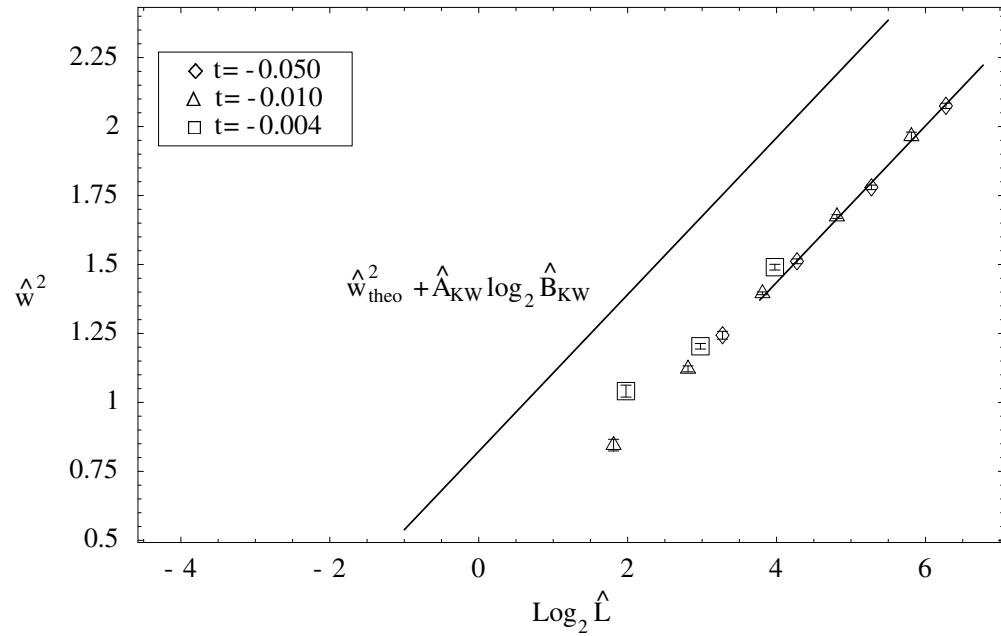


Abb. 9.32: Linearer Fit an die universellen totalen Gradient-Dicken (für  $B = L$ ) aus Abb. 9.28, zusammen mit der mit einem Offset versehenen theoretischen Geraden  $\hat{w}_{\text{theo}}^2 + \hat{A}_{\text{KW}} \log_2 \hat{B}_{\text{KW}}$ .

# Kapitel 10

## Vergleich mit anderen Monte-Carlo-Simulationen

In diesem Kapitel werden die in dieser Arbeit erhaltenen Monte-Carlo-Resultate verglichen mit Ergebnissen der Simulationen von Hasenbusch und Pinn [HP92], von Bürkner und Stauffer [BS83], von Mon, Landau und Stauffer [MLS90] sowie von Stauffer [St97]. Bis auf Stauffer untersuchen diese Autoren die Proportionalität der Gesamt-Dicke  $\hat{w}^2$  zum Logarithmus der Systemlänge  $\hat{L}$ , so dass ein Vergleich nur mit den Resultaten für die totalen Dicken (d. h. für  $B=L$ ) und der sich daraus ergebende Abschätzung des Kapillarwellen-Cutoffs  $\hat{B}_{\text{KW}}$  aus Abschnitt 9.4 erfolgen kann. Dazu werden alle Daten in universelle Form, d. h. in Einheiten der doppelten Korrelationslänge, umgerechnet. Da alle Autoren (bis auf Stauffer) mit einer Dicken-Definition über den Gradienten (Definition 2a) aus Abschnitt 5.1) arbeiten, ist die theoretische Vorhersage die Faltungsnäherungs-Dicke nach dieser Definition (6.14), (6.15):

$$\begin{aligned}\hat{w}^2 &= \hat{A}_{\text{KW}} \log_2 \hat{L} + \hat{w}_{\text{intr}}^2 - \hat{A}_{\text{KW}} \log_2 \hat{B}_{\text{KW}} \\ &= 0.284 \log_2 \hat{L} + 0.822 - 0.284 \log_2 \hat{B}_{\text{KW}}\end{aligned}\quad (10.1)$$

Die Autoren in [HP92], [BS83] und [MLS90] arbeiten bei verschiedenen Temperaturen recht weit unterhalb der kritischen Temperatur zwischen  $t = -0.4$  und  $t = -0.2$ . Im Folgenden werden ihre Ergebnisse für die höchste verwendete Temperatur  $t = -0.2$  betrachtet, die einer Korrelationslänge von  $\xi = 0.690$  entspricht. Nach einer Umrechnung erhält man folgende Geraden-Gleichungen:

$$\begin{aligned}\hat{w}_{\text{HP92}}^2 &= 0.86 \hat{A}_{\text{KW}} \log_2 \hat{L} + 1.10 \\ \hat{w}_{\text{MLS90}}^2 &= 0.98 \hat{A}_{\text{KW}} \log_2 \hat{L} + 0.47 \\ \hat{w}_{\text{BS83}}^2 &= 0.78 \hat{A}_{\text{KW}} \log_2 \hat{L} + 0.89\end{aligned}$$

Diese werden in Abb. 10.1 verglichen mit den theoretischen Dicken  $\hat{w}_{\text{theo}}^2$  aus Formel (10.1) und den in dieser Arbeit erhaltenen totalen Dicken  $\hat{w}_{\text{hier}}^2$  aus der vierten Gleichung von (9.3):

$$\begin{aligned}\hat{w}_{\text{theo}}^2 &= 1.00 \hat{A}_{\text{KW}} \log_2 \hat{L} + 0.822 - \hat{A}_{\text{KW}} \log_2 \hat{B}_{\text{KW}} \\ \hat{w}_{\text{hier}}^2 &= 0.99 \hat{A}_{\text{KW}} \log_2 \hat{L} + 0.30\end{aligned}$$

Dabei entspricht der Bereich, in dem die Geraden eingezeichnet sind, in etwa dem Bereich von  $\hat{L} = L/2\xi$ , in dem die Simulationen durchgeführt wurden.

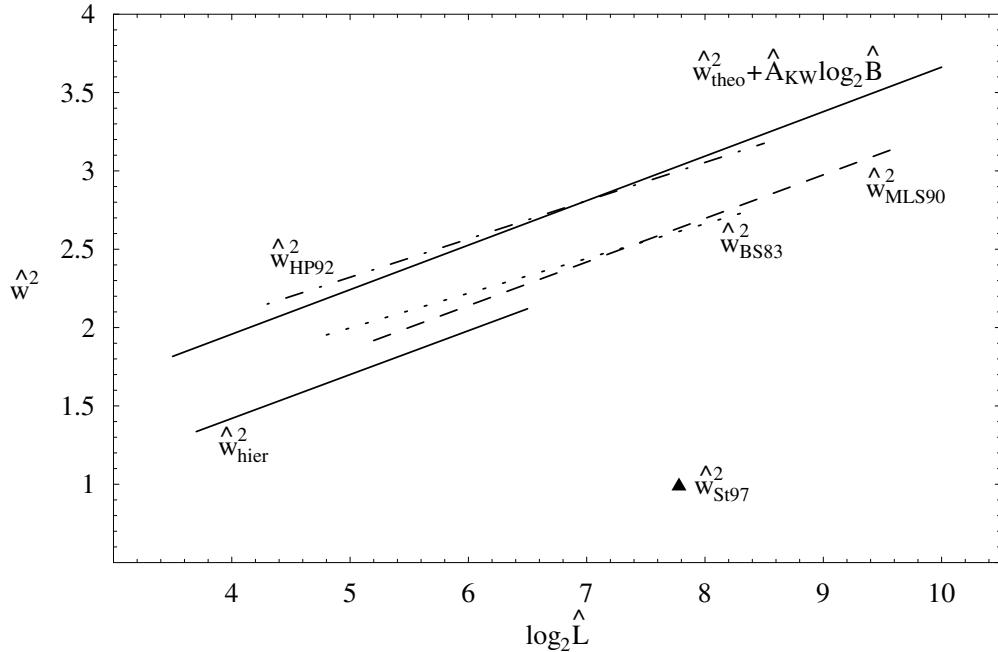


Abb. 10.1: Vergleich der Dicken  $\hat{w}^2$  aus verschiedenen Monte-Carlo-Simulationen, Referenzen als Indizes.

Zusätzlich ist in Abb. 10.1 ein Einzelwert von Stauffer [St97] eingetragen, der dort als Dicke eines tanh-Fits an das in der Simulation bei  $t = -0,01$  erhaltene Grenzflächenprofil berechnet wurde. Dabei ist zu beachten, dass das von Stauffer gemessene Grenzflächenprofil nicht die intrinsische Dicke, sondern nur die Kapillarwellen-Dicke enthält, weswegen der Wert von Stauffer deutlich niedriger liegt als die anderen Werte.

Alle Dicken liegen in derselben Größenordnung; die Geradensteigungen stimmen für die Daten dieser Arbeit sowie für die Daten aus [MLS90] mit dem theoretischen Wert der Kapillarwellen-Theorie überein. Aus den Achsenabschnitten kann man gemäß

$$\hat{B}_{\text{KW}} = \frac{B}{2\xi} = 2^{(\hat{w}_{\text{intr}}^2 - \text{Achsenabschnitt})/\hat{A}_{\text{KW}}}$$

den Kapillarwellen-Cutoff  $B_{\text{KW}}$  abschätzen. Man erhält vernünftige Werte:

aus [HP92]:	$B_{\text{KW}} = 1.0 \xi$
aus [MLS90]:	$B_{\text{KW}} = 4.7 \xi$
aus [BS83]:	$B_{\text{KW}} = 1.7 \xi$
hier:	$B_{\text{KW}} = 7.2 \xi$

Wieder ist dieser Abschätzung aufgrund der exponentiellen Abhängigkeit nur bedingt zu trauen.

Würde man statt der theoretischen intrinsischen Mean-field-Dicke  $\hat{w}_{\text{intr}}^2 = 0.822$  die Dicke in 1-Loop-Ordnung verwenden, so würde die theoretische Gerade  $\hat{w}_{\text{theo}}^2$  in Abb. 10.1 höher liegen und die Abschätzungen für den Cutoff  $B_{\text{KW}}$  entsprechend höher ausfallen.

## Kapitel 11

# Mögliche Erweiterungen der Theorien

Die in Teil I dargestellten Theorien zur Beschreibung von Grenzflächen enthalten verschiedene Näherungen, die natürlich verbessert werden können, z. B.:

- In der  $\phi^4$ -Theorie aus Kapitel 2 können weitere Korrekturen zur Mean-field-Näherung, d. h. höhere Loop-Ordnungen oder weitere Terme in der Gradienten-Entwicklung, mitgenommen werden. Eine 2-Loop-Rechnung wurde von Küster [Ku01] durchgeführt und ergibt ein kompliziertes intrinsisches Profil, das aufgrund der Berücksichtigung von mehr thermischen Fluktuationen eine größere Dicke liefern sollte als das 0-Loop- bzw. 1-Loop-Profil. Dies würde für die numerischen Ergebnisse keine Verbesserung bringen, da die numerische intrinsische Dicke (sofern man davon sprechen kann) ohnehin kleiner war als erwartet.
- In der Kapillarwellen-Theorie aus Kapitel 3 kann die Gradientenentwicklung der Hamiltonfunktion zu höheren Ordnungen berücksichtigt werden. Dies wurde bis zur nächsthöheren Ordnung von Meunier [Me87] durchgeführt und bewirkt effektiv eine Oberflächenspannung, die vom Wellenvektor abhängt:

$$\sigma(q) = \sigma_\infty + \kappa q^2 \quad (11.1)$$

mit  $\kappa = \frac{3}{8\pi}$ . Dabei ist  $\sigma_\infty$  die makroskopische Oberflächenspannung, die bisher mit  $\sigma$  bezeichnet wurde.

- In der Faltungsnäherung aus Kapitel 4 wurde die Wechselwirkung zwischen den Kapillarwellen-Fluktuationen und den intrinsischen Fluktuationen vernachlässigt. Mecke und Dietrich [MD99] berücksichtigen im Rahmen der Dichtefunktionaltheorie die Verformung des intrinsischen Profils aufgrund der Kapillarwellen-Fluktuationen. In der Nähe der kritischen Temperatur reduziert sich die Änderung gegenüber der Faltungsnäherung wieder auf eine vom Wellenvektor abhängige Oberflächenspannung von der Form (11.1), wobei diesmal der Koeffizient  $\kappa$  unbekannt ist.

Effektiv ist also die nächste Verbesserung der betrachteten Theorien in der Nähe des kritischen Punktes die Einführung einer Oberflächenspannung, die von der Wellenzahl abhängt:

$$\boxed{\sigma(q) = \sigma_\infty + \kappa q^2} \quad (11.2)$$

Die Konsequenz ist ein neuer Wert für die Kapillarwellen-Dicke:

$$w_{\text{KW}}^2 = \frac{1}{2\pi} \int dq \frac{1}{q^2 (\sigma_\infty + \kappa q^2)}$$

Beschränkt man das Integral wieder auf  $\frac{2\pi}{L} < q < \frac{2\pi}{B_{\text{KW}}}$ , so ergibt sich

$$w_{\text{KW}}^2 = \frac{1}{4\pi\sigma_\infty} \ln \frac{\sigma_\infty L^2 + 4\pi^2\kappa}{\sigma_\infty B_{\text{KW}}^2 + 4\pi^2\kappa}. \quad (11.3)$$

Für  $\kappa \rightarrow 0$  erhält man das Ergebnis der ursprünglichen Kapillarwellentheorie:

$$w_{\text{KW}}^2 \xrightarrow{\kappa \rightarrow 0} \frac{1}{2\pi\sigma_\infty} \ln \frac{L}{B_{\text{KW}}} \quad (11.4)$$

Durch die höhere Potenz im Nenner ist aber nun eigentlich kein Cutoff  $B_{\text{KW}}$  mehr notwendig. Lässt man deshalb in (11.3)  $B_{\text{KW}} \rightarrow 0$  gehen, so ist die Dicke gleich

$$w_{\text{KW}}^2 = \frac{1}{4\pi\sigma_\infty} \ln \left( \frac{\sigma_\infty L^2}{4\pi^2\kappa} + 1 \right) \approx \frac{1}{2\pi\sigma_\infty} \ln \frac{L}{2\pi\sqrt{\kappa/\sigma_\infty}},$$

wobei die Näherung für  $L^2 \gg \kappa/\sigma_\infty$  gilt. Durch Vergleich mit (11.4) kann man den Kapillarwellen-Cutoff identifizieren:

$$B_{\text{KW}} = 2\pi \sqrt{\frac{\kappa}{\sigma_\infty}} \quad (11.5)$$

Im Falle der erweiterten Gradientenentwicklung aus [Me87] ergibt sich mit  $\kappa = \frac{3}{8\pi}$ , den Scaling-Relationen (2.9) für die Oberflächenspannung und die Korrelationslänge sowie dem Wert (6.13) für die Konstante  $R = \sigma_0 f^2$ :

$$B_{\text{KW}} = \sqrt{\frac{3\pi}{2\sigma_\infty}} = \sqrt{\frac{3\pi}{2R}} \xi = 7,0(1)\xi \quad (11.6)$$

Dieser Wert für  $B_{\text{KW}}$  steht im Einklang mit den Ergebnissen der numerischen Simulationen in dieser Arbeit.

# Kapitel 12

## Zusammenfassung

Grenzflächen in der Nähe des kritischen Punktes wurden in dieser Arbeit auf zwei Größenskalen beschrieben:

- Auf der Größenordnung

$$a < \lambda < B_{\text{intr}} \sim \xi \quad (12.1)$$

zwischen einer mikroskopischen Länge  $a$  und einem Cutoff  $B_{\text{intr}}$ , der von der Größenordnung der Korrelationslänge  $\xi$  ist, wird die Grenzfläche beschrieben durch ein intrinsisches Profil, berechnet in der Landau- oder der  $\phi^4$ -Theorie in 1-Loop- und lokaler Potenzial-Approximation.

- Auf makroskopischer Größenordnung

$$\xi \sim B_{\text{KW}} < \lambda < L \quad (12.2)$$

zwischen einem Cutoff  $B \sim \xi$  und der Systemgröße  $L$  wird die Grenzfläche modelliert als schwingende Membran der Kapillarwellen-Theorie.

Dabei ist die Unterscheidung zwischen intrinsischer und makroskopischer Struktur außerhalb einer gegebenen Theorie unklar. In dieser Arbeit wurde deshalb versucht, die beiden Beschreibungen bei einer numerisch simulierten Ising-Modell-Grenzfläche zu trennen, indem die kritischen Grenzflächen-Fluktuationen durch eine Hoch- bzw. Tiefpass-Filterung mittels eines Blocking-Verfahrens kontrolliert wurden.

Auf großen Längenskalen waren die Aussagen der Kapillarwellen-Theorie gut erfüllt. Dadurch konnte zunächst der Kapillarwellen-Cutoff auf zwei Arten abgeschätzt werden. Durch Vergleich der Verteilung der Grenzflächen-Positionen mit der Vorhersage der Kapillarwellen-Theorie ergab sich

$$B_{\text{KW}} \sim (5 - 7)\xi. \quad (12.3)$$

Durch Messung der Dicken und Verwendung der Faltungsnäherung erhielt man hingegen die Abschätzung

$$B_{\text{KW}} \sim 30\xi \quad (12.4)$$

bei Definition der Dicke über das Gradient-Quadrat sowie

$$B_{\text{KW}} \sim (1 - 9)\xi \quad (12.5)$$

bei Definition der Dicke über den Gradienten und bei Betrachtung der auf universelle Form transformierten Dicken nach beiden Definitionen. Dabei ist die Abschätzung (12.3) aus der Positions-Verteilung vertrauenswürdiger als die anderen beiden, die exponentiell von den verwendeten Parametern abhängen.

Die Abschätzungen (12.3) und (12.5) sind realistisch und von derselben Größenordnung, während die Abschätzung (12.4) aus den Gradient-Quadrat-Dicken einen unrealistisch hohen Wert liefert. Dies ist vermutlich darin begründet, dass das Gradienten-Quadrat als zweites Moment numerisch weniger robust ist als der Gradient selbst, so dass die Gradient-Quadrat-Dicken anfälliger für numerische Artefakte sind.

Im Gültigkeitsbereich der Mean-field-Theorie sollte die Dicke  $w^2$  konstant gleich der intrinsischen Dicke  $w_{\text{intr}}^2$  sein. Ein solcher Bereich war in der numerischen Simulation nicht zu beobachten. Auch eine Verwendung der 1-Loop- $\phi^4$ -Theorie in lokaler Potenzialapproximation brachte keine Verbesserung. Dies legt nahe, dass es nicht sinnvoll ist, von einem intrinsischen Profil zu sprechen, könnte aber auch darin begründet sein, dass das Verhältnis  $\xi/a$  von Korrelationslänge  $\xi$  zu Gitterkonstante  $a$  in den durchgeführten Simulationen zu niedrig war, um intrinsisches Verhalten beobachten zu können. Verwendet man dennoch die erhaltenen Daten zur Abschätzung des intrinsischen Cutoffs, so erhält man aus allen Simulationen realistische Werte

$$B_{\text{intr}} \sim (3 - 8)\xi \quad (12.6)$$

in derselben Größenordnung wie der Kapillarwellen-Cutoff  $B_{\text{KW}}$ . Insofern könnte es auch sein, dass das intrinsische Verhalten prinzipiell von der Kapillarwellen-Verbreiterung überdeckt wird. Um die Frage, ob intrinsisches Verhalten beobachtbar ist, wirklich zu klären, müssten verbesserte Simulationen durchgeführt werden, z. B.:

- höheres Verhältnis  $\xi/a$ , um einen nicht durch Gitterartefakte verfälschten intrinsischen Bereich zu haben. Dies würde bedeuten, näher an der kritischen Temperatur zu arbeiten.
- Simulation der  $\phi^4$ -Theorie anstelle des Ising-Modells zur Vermeidung von „Ising-Artefakten“.

# Abbildungsverzeichnis

1	Momentaufnahme einer Ising-Grenzfläche . . . . .	vi
2.1	Doppelmulden-Potenzial . . . . .	5
2.2	Renormiertes Grenzflächenprofil . . . . .	16
2.3	Renormiertes Grenzflächenprofil, alternative Darstellung . . . . .	17
2.4	Vergleich ursprünglicher und alternativer Darstellung . . . . .	18
3.1	Grenzfläche als schwingende Membran . . . . .	21
4.1	Grenze in Mean-field-, Kapillarwellen- und Faltungs-Näherung	26
4.2	Ausschmierung des Treelevel-Profils . . . . .	26
4.3	Ausschmierung des 1-Loop-Profils . . . . .	27
4.4	Kapillarwellen und Profilform . . . . .	28
5.1	Typische Profilform . . . . .	29
5.2	Näherung für die Dicke nach Definition $p \sim c'^2$ . . . . .	33
5.3	Vergleich der Dicken-Definitionen . . . . .	34
5.4	1-Loop-Dicken in Abhängigkeit von $s$ . . . . .	36
5.5	1-Loop-Dicken in Abhängigkeit von $u$ . . . . .	36
6.1	Wandern der Grenzfläche . . . . .	44
7.1	Blocking-Verfahren . . . . .	46
7.2	Lokale Magnetisierungsprofile für $B=1, 2, 4, 8$ . . . . .	47
7.3	Lokale Magnetisierungsprofile für $B=16, 32, 64, 128$ . . . . .	48
7.4	Rand-Schiebe-Verfahren . . . . .	50
7.5	Grenzflächenposition nach dem Rand-Schiebe-Verfahren . . . . .	51
7.6	Bestimmung der Grenzflächenposition für verschiedene $B$ . . . . .	52
7.7	Entartung der Grenzflächenposition . . . . .	54
7.8	Mittlere Entartung der Grenzflächenposition . . . . .	54
7.9	Mittlere Grenzflächenrichtung . . . . .	55
7.10	Varianzen nach verschiedenen Methoden . . . . .	57
7.11	Grenzflächenprofile für $B=1, 2, 4, 8$ . . . . .	59
7.12	Grenzflächenprofile für $B=16, 32, 64, 128$ . . . . .	60
7.13	Gewichtsfunktionen zur Definition der Dicke . . . . .	62
7.14	Mittlere Grenzflächenposition . . . . .	63
8.1	Verteilung der Cluster-Größe . . . . .	67

8.2	Integrierte Autokorrelationszeit . . . . .	69
8.3	Equilibrierung nach einem Cold start . . . . .	70
8.4	Equilibrierung nach einem Hot start . . . . .	70
8.5	Bulk-Magnetisierung . . . . .	71
8.6	Fehler der Varianz nach Binning . . . . .	73
9.1a)	Grenzflächen-Membran, kleine Blockgrößen . . . . .	77
9.1b)	Grenzflächen-Membran, mittlere Blockgrößen . . . . .	78
9.1c)	Grenzflächen-Membran, große Blockgrößen . . . . .	79
9.2	Verteilungen $P(h)$ mit Gauß-Fits für $t = -0,01$ . . . . .	80
9.3	Momente von $P(h)$ für $t = -0,01$ . . . . .	84
9.4	Kurtosis von $P(h)$ für verschiedene Temperaturen . . . . .	84
9.5	Geschätzte Varianzen als Funktion von $L$ für $t = -0,05$ . . . . .	85
9.6	Gauß-Fit-Varianzen als Funktion von $L$ für $t = -0,05$ . . . . .	85
9.7	Geschätzte Varianzen als Funktion von $B$ für $t = -0,05$ . . . . .	86
9.8	Gauß-Fit-Varianzen als Funktion von $B$ für $t = -0,05$ . . . . .	86
9.9	Steigungen der Varianzen für $t = -0,05$ . . . . .	87
9.10	Achsenabschnitte der Varianzen für $t = -0,05$ . . . . .	87
9.11	Signifikanzlevel der Verteilungen $P(h)$ bei $t = -0,05$ . . . . .	88
9.12	Signifikanzlevel der Verteilungen $P(h)$ bei $t = -0,01$ . . . . .	88
9.13	Grenzflächenprofile für verschiedene Blockgrößen . . . . .	89
9.14	Totale Grenzflächenprofile für verschiedene Systemgrößen . . . . .	89
9.15	Gradient-Quadrat-Dicken $w^2$ bei $t = -0,01$ . . . . .	93
9.16	Gradient-Dicken $w^2$ bei $t = -0,01$ . . . . .	93
9.17	Lineare Fits an Gradient-Quadrat-Dicken $w^2$ bei $t = -0,01$ . . . . .	94
9.18	Lineare Fits an Gradient-Dicken $w^2$ bei $t = -0,01$ . . . . .	94
9.19	Steigungen der Gradient-Quadrat-Dicken $w^2$ bei $t = -0,01$ . . . . .	95
9.20	Steigungen der Gradient-Dicken $w^2$ bei $t = -0,01$ . . . . .	95
9.21	Achsenabschnitte der Gradient-Quadrat-Dicken $w^2$ bei $t = -0,01$ . . . . .	96
9.22	Achsenabschnitte der Gradient-Dicken $w^2$ bei $t = -0,01$ . . . . .	96
9.23	Gradient-Quadrat-Dicken $w^2$ bei $t = -0,05$ . . . . .	97
9.24	Gradient-Dicken $w^2$ bei $t = -0,05$ . . . . .	97
9.25	Gradient-Quadrat-Dicken $w^2$ bei $t = -0,004$ . . . . .	98
9.26	Gradient-Dicken $w^2$ bei $t = -0,004$ . . . . .	98
9.27	Universelle Gradient-Quadrat-Dicken . . . . .	101
9.28	Universelle Gradient-Dicken . . . . .	102
9.29	Linearer Fit an universelle Gradient-Quadrat-Dicken . . . . .	103
9.30	Linearer Fit an universelle Gradient-Dicken . . . . .	103
9.31	Linearer Fit an universelle totale Gradient-Quadrat-Dicken . . . . .	104
9.32	Linearer Fit an universelle totale Gradient-Dicken . . . . .	104
10.1	Vergleich mit anderen Monte-Carlo-Simulationen . . . . .	106

# Literaturverzeichnis

- [Am78] D. AMIT 1978. *Field theory, the renormalization group, and critical phenomena*. McGraw-Hill, New York.
- [Br99] S. BRANDT 1999. *Data analysis*. Springer, New York.
- [BT96] H. BLÖTE und A. TALAPOV 1996. *The magnetization of the 3D Ising Model*. J. Phys. A **29**, 5727. Eprint: arXiv: cond-mat/9603013.
- [BF84] E. BRÉZIN und S. FENG 1984. *Amplitude of the surface tension near the critical point*. Phys. Rev. B **29**, 472.
- [BLS65] F. BUFF, R. LOVETT und F. STILLINGER 1965. *Interfacial density profile for fluids in the critical region*. Phys. Rev. Lett. **15**, 621.
- [BS83] E. BÜRKNER und D. STAUFFER 1983. *Monte Carlo study of surface roughening in the three-dimensional Ising model*. Z. Phys. B - Condensed Matter **53**, 241.
- [Co71] W. CONOVER 1971. *Practical nonparametric statistics*. Wiley, New York.
- [FP89] H. FLYVBJERG und H. PETERSEN 1989. *Error estimates on averages of correlated data*. J. Chem. Phys. **91**, 461.
- [Go92] N. GOLDENFELD 1992. *Lectures on phase transitions and the renormalization group*. Addison-Wesley.
- [GZ98] R. GUIDA und J. ZINN-JUSTIN 1998. *Critical exponents of the  $N$ -vector model*. J. Phys. A **31**, 8103.
- [HMP96] M. HASENBUSCH, S. MEYER und K. PÜTZ 1996. *The roughening transition of the 3D Ising interface: A Monte Carlo Study*. J. Stat. Phys. **85**, 1736. Eprint: arXiv: hep-lat/9601011.
- [HP92] M. HASENBUSCH und K. PINN 1992. *Surface tension, surface stiffness, and surface width of the 3-dimensional Ising model on a cubic lattice*. Physica A **192**, 342. Eprint: arXiv: hep-lat/9209013.
- [HP97] M. HASENBUSCH und K. PINN 1997. *The interface tension of the 3-dimensional Ising-model in the scaling region*. Physica A **245**, 366. Eprint: cond-mat/9704075

- [HW03] M. HASENBUSCH und U. WOLFF 2003. Persönliche Mitteilung per Email.
- [Ja84] D. JASNOW 1984. *Critical phenomena at interfaces*. Rep. Prog. Phys. **47**, 1059.
- [Ku01] J. KÜSTER 2001. *Kritisches Verhalten fluktuierender Grenzflächen*. Dissertation, Universität Münster.
- [La37] L. LANDAU 1937. *On the theory of phase transitions*. Phys. Z. Sowjet. **11**, 26. Zitiert aus der englische Übersetzung: T. HAAR 1965. *Collected papers of L. D. Landau*. Pergamon Press und Gordon and Breach.
- [LF89] A. LIU und M. FISHER 1989. *The three-dimensional Ising model revisited numerically*. Physica A **156**, 35.
- [MD99] K. MECKE und S. DIETRICH 1999. *Effective Hamiltonian for liquid-vapor interfaces*. Phys. Rev. E **59**, 6766.
- [Me99] P. PRECHTL und F. BURKARD (Hrsg.) 1999. *Metzler-Philosophie-Lexikon*, 2. Auflage. Metzlersche Verlagsbuchhandlung Stuttgart.
- [Me87] J. MEUNIER 1987. *Liquid interfaces: role of the fluctuations and analysis of ellipsometry and reflectivity measurements*. J. Physique **48**, 1819.
- [MLS90] K. MON, D. LANDAU und D. STAUFFER 1990. *Interface roughening in the three-dimensional Ising model*. Phys. Rev. B **42**, 545.
- [MGL95] G. MÜNSTER, H. GRIESSHAMMER und D. LEHMANN 1995. *Field theory, critical phenomena, and interfaces*. Lecture Notes, Graduiertenkolleg Erlangen-Regensburg 17.05.1995. Eprint: arXiv: hep-th/9610197
- [Mu97] G. MÜNSTER 1997. *Critical phenomena, strings, and interfaces*. In: H. DORN, D. LÜST und G. WEIGT (Hrsg.) 1998. *Theory of elementary particles, Proceedings of the 31st International Symposium Ahrenshoop*. Wiley-VHC, Berlin. Eprint: arXiv: hep-th/9802006.
- [Mu03] G. MÜNSTER 2003. Persönliche Mitteilung.
- [NB99] M. NEWMAN and G. BARKEMA 1999. *Monte Carlo Methods in Statistical Physics*. Clarendon Press, Oxford.
- [PTVF92] W. PRESS, S. TEUKOLSKY, W. VETTERLING und B. FLANNERY 1992. *Numerical recipes in C. The art of scientific computing*. Cambridge University Press.
- [Ro82] J. ROWLINSON und S. WIDOM 1982. *Molecular theory of capillarity*. Clarendon Press, Oxford.

- [Sa94] S. SAFRAN 1994. *Statistical thermodynamics of surfaces, interfaces, and membranes*. Addison-Wesley Publishing.
- [So89] A. SOKAL 1989. *Monte Carlo methods in statistical mechanics: foundations and new algorithms*. Cours de troisième cycle de la physique en Suisse Romande.
- [St97] D. STAUFFER 1997. *Oil-water interfaces in the Ising-model*. Progr. Colloid Polym. Sci. **103**, 60.
- [vdW93] J. VAN DER WAALS 1893. *The thermodynamic theory of capillarity under the hypothesis of a continuous variation of density*. Verhandel. Konink. Akad. Weten. **1**, No. 8, 56. Zitiert aus der englischen Übersetzung: J. ROWLINSON 1979. J. Stat. Phys. **20**, 121.
- [Vo03] B. VOGT 2003. *Energieaufspaltung im zweidimensionalen Ising-Modell*. Diplomarbeit, Universität Münster.
- [We77] J. WEEKS 1977. *Structure and thermodynamics of the liquid-vapor interface*. J. Chem. Phys. **67**, 3106.
- [WSMB99] A. WERNER, F. SCHMID, M. MÜLLER und K. BINDER 1999. “Intrinsic“ profiles and capillary waves at homopolymer interfaces: A Monte Carlo study. Phys. Rev. E **59**, 728.

# Danksagung

An dieser Stelle möchte ich allen danken, die zum Entstehen dieser Arbeit beigetragen haben.

Zuallererst danke ich Herrn Professor Gernot Münster für die interessante Themenstellung und die freundliche Betreuung meiner Arbeit.

Der Arbeitsgruppe im Institut danke ich für die angenehme Arbeitsatmosphäre, insbesondere meinen Bürokollegen Björn Schwendtker, Patrick Fritzsch und Henning Jürgens.

Für die Hilfe bei programmier- und rechnertechnischen Problemen danke ich Roland Peetz, Jochen Heitger und Martin Leweling. Wolfgang Thomsen und Christoph Schürmann danke ich für die Diskussion zu speziellen Fragen bei Markov-Ketten.

Weiterhin danke ich Philippe de Forcrand für die zur Verfügung gestellte Version des Wolff-Algorithmus, die z. T. als Vorlage für den in dieser Arbeit verwendeten Algorithmus diente. Michael Röttger danke ich für das Überlassen seinen L<sup>A</sup>T<sub>E</sub>X-Daumenkino-Codes, der bei dem Daumenkino in diesem Schriftstück benutzt wurde.

Für das Korrekturlesen danke ich Tobias Maletzky, Rafaela Hillerbrand und Dirk Homeier.

Der Studienstiftung des deutschen Volkes danke ich für die ideelle und finanzielle Unterstützung.

Ein ganz besonderer Dank gilt meinen Eltern, auf deren Unterstützung ich mich während meines Studiums stets verlassen konnte.

Kaj finfine mi dankas vin, mia kara foketo, pro ĉio.



Hiermit versichere ich, diese Arbeit selbstständig angefertigt und keine anderen als die angegebenen Hilfsmittel verwendet zu haben.

Münster, im Januar 2004