

Diplomarbeit

Numerische Untersuchung kritischer
Grenzflächen in der ϕ^4 -Theorie

Simon Papenkort

7. Januar 2009

Diese korrigierte Version unterscheidet sich nur geringfügig von der am 7. Januar 2009 dem Prüfungsamt vorgelegten Arbeit.



Inhaltsverzeichnis

1	Einleitung	7
I	Theorie	9
2	Phasenübergänge	11
2.1	Einleitung	11
2.2	Landau-Theorie	14
2.2.1	Klassische Lösung und Randbedingungen	16
2.3	Motivation der ϕ^4 -Theorie	17
2.3.1	Mikroskopische Landau-Theorie	18
2.3.2	Erzeugendes Funktional	19
2.4	Intrinsisches Profil der ϕ^4 -Theorie bis zur ersten Ordnung nach Küster	20
2.4.1	Nullte Ordnung: Landau-Theorie	21
2.4.2	Erste Ordnung	21
2.5	Grenzflächenfluktuationen	23
3	Kapillarwellen-Theorie und Faltungsnäherung	25
3.1	Kapillarwellen-Theorie	25
3.2	Faltungsnäherung	27
4	Grenzflächendicke	29
4.1	Definitionen	29
4.1.1	Gradient	30
4.1.2	Gradientenquadrat	30
II	Monte-Carlo-Simulation	31
5	Ziel der Simulation	33
5.1	Theoretische Vorhersagen	33
5.2	Ziel und Methode	34
6	Messverfahren	37
6.1	Blocking und lokale Magnetisierungsprofile	37

6.1.1	Grenzflächenposition	37
6.1.2	Gemittelte Profile und Gradientenanalyse	38
6.2	ϕ^4 -Theorie auf dem Gitter	39
7	Prinzipien der Gleichgewichts-MC-Simulation	41
7.1	Übergangswahrscheinlichkeiten	41
7.1.1	Gleichgewichtszustand	42
7.2	Prinzipien der MC-Simulation	43
7.2.1	importance sampling	44
7.2.2	Markov-Prozesse	44
7.2.3	Ergodizität	45
7.2.4	Detailliertes Gleichgewicht	45
7.2.5	Akzeptanzwahrscheinlichkeit	46
7.3	Algorithmus	46
7.3.1	Autokorrelationszeit	47
7.3.2	Metropolis-Algorithmus	48
7.3.3	Wolff-Algorithmus im Ising-Modell	49
7.3.4	Cluster-Algorithmus für ϕ^4	51
7.4	Fehlerrechnung: Γ -Methode	52
8	Ergebnisse	59
8.1	Korrelationslänge	59
8.2	Vom Ising-Modell zur ϕ^4 -Theorie	62
8.3	Grenzflächendicke	63
8.3.1	Vergleich mit dem Ising-Modell	64
8.3.2	Vergrößerung des Parameterbereichs	65
8.3.3	Magnetisierungsprofile	66
8.3.4	Fixierung der Grenzfläche	67
9	Zusammenfassung und Ausblick	77

1 Einleitung

Jedes physikalische System, das aus mehr als einer Phase besteht hat eine Grenzfläche. Beispiele hierfür gibt es viele: Beim Kochen trennt die Wasseroberfläche die Flüssigkeit vom Dampf und im Ferromagneten unterteilen Bloch-Wände Bereiche unterschiedlicher Magnetisierung.

In dieser Arbeit werden wir Grenzflächen untersuchen, die bei einem Phasenübergang 2. Art (siehe Kapitel 2) entstehen. Bei Annäherung an die kritische Temperatur divergiert die Korrelationslänge und mit ihr die Grenzschichtdicke. Am kritischen Punkt findet ein Phasenübergang statt und das System ist homogen. Es treten Fluktuationen auf allen Größenskalen auf: das System wird selbstähnlich und zeigt innerhalb einer bestimmten Klasse Universalität.

Zur Beschreibung der Fluktuationen werden wir in Kapitel 2.3 die ϕ^4 -Theorie motivieren. Diese ist allerdings nicht analytisch lösbar, liefert aber in nullter Ordnung die Landau-Theorie. Aus diesem Grund werden wir die intrinsische Landau- und die makroskopische Kapillarwellen-Theorie, die jeweils einen Teil der Fluktuationen der Grenzfläche beschreiben können, in ein Modell zusammenfassen. Dieser Aufbau der Theorie unterteilt die Fluktuationen in zwei Größenordnungen. Unser Ziel ist es, anhand der Grenzflächendicke, welche in den beiden Bereichen ein qualitativ unterschiedliches Verhalten zeigt, den Übergang zwischen den verschiedenen Regimen zu untersuchen.

Bei einer Monte-Carlo-Simulation mit dem Ising-Modell konnte bisher das intrinsische Grenzprofil nicht gezeigt werden. Wir werden deshalb im zweiten Teil der Arbeit die ϕ^4 -Theorie auf dem Gitter in einer Monte-Carlo-Rechnung simulieren und untersuchen, welche Effekte für die Abweichungen der numerischen Ergebnisse von den theoretischen Vorhersagen verantwortlich sind (Kapitel 8).

Das primäre Ziel der Statistischen Mechanik ist es, die physikalischen Eigenschaften von Systemen zu berechnen, die aus sehr vielen Teilchen bestehen. Obwohl häufig nur wenige unterschiedliche Teilchen vorkommen, verhindert ihre schiefe Anzahl die Bewegungsgleichungen exakt mathematisch zu lösen. Trotzdem wissen wir, dass das System bestimmte (thermodynamische) makroskopische Eigenschaften besitzt, wie zum Beispiel beim idealen Gas den Druck oder die Temperatur, welche sich gut vorhersehbar verhalten. Die Idee der Statistischen Mechanik ist, die Bewegungsgleichungen nicht zu lösen, sondern das Problem zu umgehen, indem die makroskopischen Größen direkt durch eine probabilistische Behandlung berechnet werden.

Die Monte-Carlo-Rechnung geht noch einen Schritt weiter: Anstatt explizit die

Wahrscheinlichkeit aller Zustände zu betrachten und die Zustandssumme zu bilden, simulieren wir mithilfe eines Computers ein Modellsystem, das die gleiche Wahrscheinlichkeitsverteilung hervorbringt wie das reale System. Auf die Arbeitsweise der Monte-Carlo-Simulation werden wir in Kapitel 7 eingehen.

Teil I
Theorie

2 Phasenübergänge

In diesem Kapitel werden wir die Verwendung der ϕ^4 -Theorie motivieren. Möglicherweise ist das beste Argument für den Landau-Ginzburg-Hamiltonian, dass jeder Term absolut notwendig ist und wir keinen Term weglassen können, ohne die Physik essenziell zu ändern.

Nach einigen Vorbemerkungen zu Phasenübergängen (für eine ausführliche Darstellung siehe z.B. [LL66]) werden wir zunächst die phänomenologische Landau-Theorie betrachten, welche das Verhalten von Grenzflächen nahe des kritischen Punkts bis zu einigen Korrelationslängen beschreiben kann. Indem wir die Theorie wieder um die unberücksichtigten Fluktuationen ergänzen, werden wir auf die ϕ^4 -Theorie geführt, deren nullte Ordnung mit der Landau-Theorie übereinstimmt.

2.1 Einleitung

Im Gleichgewicht lässt sich der Zustand eines homogenen Körpers (z.B. der Druck oder die Temperatur) durch zwei beliebige thermodynamische Größen beschreiben. Umgekehrt können wir aber nicht fordern, dass er für ein beliebiges Wertepaar homogen ist, sondern es ist möglich, dass der Körper in zwei verschiedene, aber homogene Teile zerfällt. Diese Zustände, die im Gleichgewicht koexistieren und sich an einer *Grenzfläche* berühren, werden *Phasen* genannt, ein Beispiel hierfür ist die Blasenbildung beim Sieden.

Voraussetzung für ein Gleichgewicht zwischen den Phasen ist, dass die Temperatur T , der Druck p und das chemische Potential μ identisch sind:

$$\begin{aligned}T_1 &= T_2 = T, \\p_1 &= p_2 = p, \\ \mu_1 &= \mu_2.\end{aligned}\tag{2.1}$$

Wenn wir die Potentiale als Funktionen von p und T ausdrücken, so verknüpft die Gleichung

$$\mu_1(p, T) = \mu_2(p, T)\tag{2.2}$$

den Druck und die Temperatur der Phasen: durch die Wahl einer Größe wird die andere vollständig bestimmt. Indem wir in ein Koordinatensystem die Koexistenzkurve auftragen, erhalten wir das Phasendiagramm (siehe Abbildung 2.1). Ändern wir den Zustand eines Systems entlang einer Linie, die diese Grenzkurve schneidet,

tritt im Schnittpunkt eine Trennung der Phasen auf und anschließend geht der Körper in die andere Phase über. Bei einer langsamen Zustandsänderung ist es möglich, dass der Körper sich auch noch jenseits der Kurve im homogenen Zustand befindet, obwohl es im Gleichgewicht schon zur Trennung der Phasen hätte kommen müssen. Diese Zustände sind aber metastabil und man spricht von unterkühltem Dampf und überhitzter Flüssigkeit.

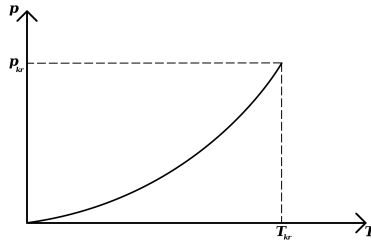


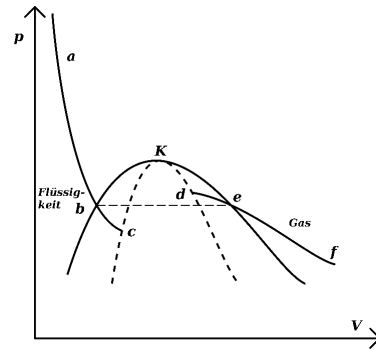
Abbildung 2.1: Phasendiagramm in der p - T -Ebene: Die Koexistenzkurve endet im kritischen Punkt.

Phasenübergänge dieses Typs sind immer mit der Erzeugung oder Vernichtung von *latenter Wärme* begleitet und zeigen sich in einer Unstetigkeit in der ersten Ableitung eines thermodynamischen Potentials. Man bezeichnet diese Klasse von Zustandsänderungen als *Phasenübergänge 1. Art*.

Eine Koexistenzkurve kann in einem sogenannten *kritischen Punkt* enden, in dem der Unterschied zwischen den Phasen verschwindet: Für Temperaturen und Drücke jenseits dieses Punktes ist der Körper immer homogen. Streng genommen lässt sich nur auf der Grenzkurve von zwei Phasen sprechen, da es möglich ist, den Zustand entlang einer Kurve, die den kritischen Punkt umläuft und nie die Grenzkurve schneidet, zu ändern. Für bestimmte Phasen, die sich durch ihre innere Symmetrie qualitativ unterscheiden (z.B. Flüssigkeit und Festkörper) kann der Phasenübergang nicht in einem kritischen Punkt enden. Die Symmetrieeigenschaften eines Festkörpers können nur existieren oder nicht; ein kontinuierlicher Übergang zu einer flüssigen Phase ist also nicht möglich. Deshalb müssen solche Koexistenzkurven entweder andere Grenzkurven schneiden oder ins Unendliche laufen.

Abbildung 2.2 zeigt einen Phasenübergang 1. Art von flüssig nach gasförmig, der im kritischen Punkt K endet. Die gestrichelte Linie begrenzt das Gebiet, in dem der Körper nicht in einer homogenen Phase existieren kann, also ein weiteres Unterkühlen des Dampfes oder Überhitzen der Flüssigkeit nicht mehr möglich ist. Das heißt die Isotherme einer Flüssigkeit abc und eines Gases def können nur im kritischen Punkt K kontinuierlich ineinander übergehen.

Man bezeichnet den *kontinuierlichen* Übergang zwischen zwei Phasen als *Phasenübergang 2. Art*. Beispiele für kontinuierliche Phasenübergänge sind der Übergang von flüssigem Helium in seinen superfluiden Zustand, der Übergang von Metall in

Abbildung 2.2: Phasenübergang 1. Art mit dem kritischen Punkt K

seiner supraleitenden Zustand oder der Übergang vom Ferromagnetismus zum Paramagnetismus. Das einfachste Modell, das einen Phasenübergang 2. Art durchlaufen kann, ist das Ising-Modell.

Da die Zustandsänderung kontinuierlich stattfindet, muss der Körper im kritischen Punkt die Symmetrieelemente beider Phasen enthalten. Häufig ist die Symmetriegruppe der Phase niedriger Temperatur eine Untergruppe von der der höheren Temperatur. Die paramagnetische Phase ist invariant unter allen räumlichen Drehungen, während in der ferromagnetischen nur die Invarianz unter Drehung um die Magnetisierungsrichtung erhalten ist. Dieses Phänomen wird *Symmetriebrechung* genannt: Der *Ordnungsparameter*, der in der Phase höherer Symmetrie null ist und einen von null verschiedenen Wert in der Phase mit geringerer Symmetrie annimmt, verschwindet kontinuierlich für $T \rightarrow T_c$.

Nahe der kritischen Temperatur zeigen makroskopische Systeme ein charakteristisches kollektives Verhalten auf großen Skalen. Die Korrelationslänge ξ , welche die Längenskala, auf der kollektives Verhalten beobachtet werden kann, beschreibt, divergiert beim Phasenübergang ebenso wie die Größe der (kritischen) Fluktuationen. Nahe der kritischen Temperatur können für die meisten Systeme viele Größen durch einfache Potenzgesetze beschrieben werden. Zum Beispiel divergieren ξ , die Suszeptibilität χ und die Oberflächenspannung σ in einem dreidimensionalen System gemäß:

$$\xi \propto \left| \frac{T - T_c}{T_c} \right|^{-\nu}, \quad \chi \propto \left| \frac{T - T_c}{T_c} \right|^{-\gamma}, \quad \sigma \propto \left| \frac{T - T_c}{T_c} \right|^{2\nu} \quad (2.3)$$

mit den *kritischen Exponenten* ν und γ .

Das System hängt also nicht länger nur von der mikroskopischen Längenskala ab, die durch die Reichweite der Wechselwirkung oder dem Gitterabstand gegeben ist, sondern es existiert in der Nähe von T_c eine weitere, dynamisch erzeugte Längenskala, die durch die Korrelationslänge beschrieben wird. Diese ist es auch, die für die

nicht-trivialen langreichweitigen oder makroskopischen Phänomene verantwortlich ist.

2.2 Landau-Theorie

Die grundlegende Idee der Landau-Theorie ist, dass in der Umgebung des kritischen Punktes die Physik des Systems durch die makroskopische Längenskala dominiert wird und in der Umgebung des kritischen Punktes die mikroskopische zugunsten der makroskopischen Längenskala zu vernachlässigt werden kann. Landau postulierte [LL66], dass man ein Funktional S , das nur von Potenzen des Ordnungsparameters ϕ und im Fall eines inhomogenen Systems von endlich vielen Ableitungen nach ϕ abhängt, finden kann, und der Zustand des Systems durch das globale Minimum von der Landau-Freien Energie S bestimmt ist. Indem wir fordern, dass S konsistent mit den Symmetrien des Systems und der Ordnungsparameter in der ungeordneten Phase null ist und in der geordneten nahe der kritischen Temperatur einen kleinen endlichen Wert annimmt, erhalten wir für die Landau-Freie Energiedichte

$$\mathcal{L}(\phi(x)) = \frac{1}{2} (\partial\phi(x))^2 + V(\phi(x)) \quad (2.4)$$

mit dem ϕ^4 Potenzial

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

Die vierte Ordnung ist die niedrigste Ordnung, die einen Phasenübergang 2. Art ermöglicht. Da ϕ sich im Vergleich zur mikroskopischen Längenskala nur sehr langsam ändert, können wir zu abrupte Sprünge im Ordnungsparameter durch den Ableitungsterm benachteiligen. Die *Kopplungskonstante* g , die *Masse* m und die *Normierungskonstante* C sind temperaturabhängige Größen. Damit das Potenzial nach unten beschränkt ist, muss $g > 0$ sein. Der Parameter m^2 ist für den Phasenübergang verantwortlich und muss deshalb bei der kritischen Temperatur T_c einen Nulldurchgang haben:

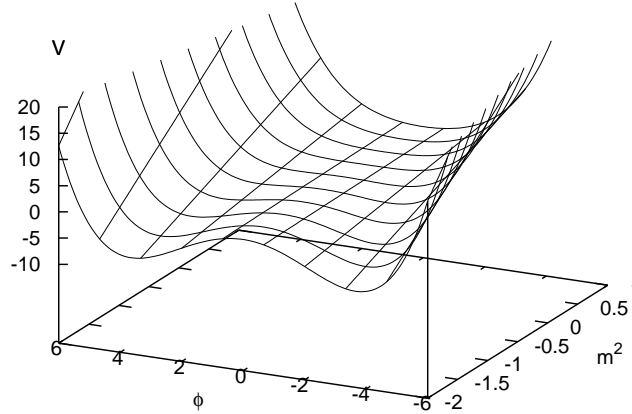
$$m^2 \propto (T - T_c). \quad (2.6)$$

Die Konstante C dient dazu, das Potenzial am Minimum v_0 auf null zu normieren:

$$V(v_0) = 0. \quad (2.7)$$

Wir können also zwischen zwei Phasen unterscheiden:

- Für $m^2 > 0$ ist das Potenzial konvex und hat ein eindeutiges Minimum bei $\phi = 0$. Das System befindet sich in der symmetrischen Phase und die Energiedichte

Abbildung 2.3: Das ϕ^4 -Potenzial in Abhängigkeit von m^2 .

ist invariant unter der Symmetrie-Transformation $\phi \rightarrow -\phi$. Das normierte Potenzial lautet:

$$V(\phi) = \frac{g}{4!}\phi^4 + \frac{m^2}{2}\phi^2 \quad (2.8)$$

- Für $m^2 < 0$ hat das Potenzial zwei Minima bei $\pm\sqrt{-6m^2/g}$. Damit das Quadrat der Masse positiv ist, wird $-2m^2$ durch m^2 ersetzt. Das normierte Potenzial lautet dann:

$$V(\phi) = \frac{g}{4!}(\phi^2 - v_0^2)^2 = \frac{g}{4!}\phi^4 - \frac{m^2}{4}\phi^2 + \frac{3}{8}\frac{m^4}{g} \quad (2.9)$$

mit

$$v_0 = \sqrt{\frac{3m^2}{g}}. \quad (2.10)$$

Die Symmetrie $\phi \rightarrow -\phi$ wird nur noch von der Gesamtheit der Minima aber nicht länger von jedem einzelnen Minimum erfüllt. Diese spontane Symmetriebrechung ermöglicht es dem System zwei Phasen auszubilden.

2.2.1 Klassische Lösung und Randbedingungen

Im thermodynamischen Gleichgewicht befindet sich das System im Grundzustand für den die *Landau-Energie*

$$S[\phi] = \int d^3x \mathcal{L}(\phi(x)) = \int d^3x \left(\frac{1}{2} (\partial\phi)^2 + V(\phi) \right) \quad (2.11)$$

minimal ist. Im Grundzustand ist der Ordnungsparameter in der symmetrischen Phase definitionsgemäß $\phi_G = 0$ und es kann keine Grenzfläche im System auftreten. Für die Phase gebrochener Symmetrie betrachten wir die Funktionalableitung von (2.11) mit dem Potenzial (2.9) und setzen sie gleich null:

$$\begin{aligned} \left[\frac{\delta S[\phi]}{\delta \phi} \right]_{\phi=\phi_G} &= [\partial^2 \phi + V'(\phi)]_{\phi=\phi_G} \\ &= \left[-\partial^2 \phi + \frac{g}{3!} \phi^3 - \frac{m^2}{2} \phi \right]_{\phi=\phi_G} \stackrel{!}{=} 0. \end{aligned} \quad (2.12)$$

Wir erhalten die beiden mögliche Minima

$$\phi_G = \pm v_0 = \pm \sqrt{\frac{3m^2}{g}}, \quad (2.13)$$

die den zwei unterschiedlichen Phasen entsprechen (siehe auch [Küs01]). Wie diese Phasen in einem System mit der quadratischen Grundfläche $L \times L$ und der Länge Z realisiert werden, hängt entscheidend von der Wahl der Anfangs- und Randbedingungen ab. Mit dem Ansatz, dass der Ordnungsparameter ausschließlich von z abhängt

$$\phi_G(x, y, z) = \phi_G(z) \quad (2.14)$$

legen wir die Grenzfläche senkrecht zur z -Richtung und können die klassische Lösung der Differentialgleichung (2.12) bestimmen. Im thermodynamischen Limes $Z \rightarrow \infty$ und L endlich erhalten wir mit den *periodischen Randbedingungen*

$$\phi_G\left(z = +\frac{Z}{2} \rightarrow \infty\right) = \phi_G\left(z = -\frac{Z}{2} \rightarrow \infty\right) \quad (2.15)$$

eine gerade Anzahl an Grenzflächen. Da die Lösungen mit zwei oder mehr Grenzflächen aufgrund ihrer höheren Energie im thermodynamischen Gleichgewicht exponentiell unterdrückt sind, bildet das System keine Grenzfläche aus und befindet sich gerade im homogenen Zustand

$$\phi_G(z) = v_0 \quad (2.16)$$

und aufgrund der Normierung des Potentials ist die Energie

$$S[\phi_G] = 0. \quad (2.17)$$

Prägen wir dem System hingegen *antiperiodische Randbedingungen*

$$\phi_G(z = +\frac{Z}{2} \rightarrow \infty) = \phi_G(z = -\frac{Z}{2} \rightarrow -\infty) \quad (2.18)$$

auf, oder lösen die Differentialgleichung unter der Nebenbedingung, dass $\phi_G(a) = 0$ für ein beliebiges aber festes a ist, dann muss eine ungerade Anzahl an Grenzflächen vorliegen. In diesem Fall ist die Situation mit genau einer Grenzfläche die energetisch günstigste und wir erhalten die *Kink-Lösung*

$$\phi_K(z) = v_0 \tanh\left(\frac{m}{2}(z - a)\right). \quad (2.19)$$

Da für die Ausbildung einer Grenzfläche Energie benötigt wird, nimmt $S[\phi_K]$ einen von null verschiedenen Wert an:

$$S[\phi_K] = \frac{2m^3}{g} L^2. \quad (2.20)$$

2.3 Motivation der ϕ^4 -Theorie

Leider zeigte sich, dass die Landau-Theorie z.B. im Vergleich mit dem später von Onsager exakt gelösten 2D-Ising-Modell falsche Vorhersagen trifft. Überraschenderweise war das in der Physik verbreitete und im Rahmen von Mean-Field-Theorien so häufig erfolgreich angewandte Prinzip der Entkopplung von stark unterschiedlichen Längenskalen nicht für die Beschreibung der kritischen Phänomene geeignet: ganz im Gegenteil sind am kritischen Punkt alle Fluktuationen relevant. Berechnet man Korrekturen zur Landau-Theorie, so treten bei T_c Divergenzen auf, welche durch Beiträge erzeugt werden, die vom Verhältnis der Korrelationslänge zur mikroskopischen Skala abhängen. Diese Situation erinnert an die Probleme der frühen Interpretation der Quantenfeldtheorie, mit dem Unterschied dass dort die mikroskopische Skala gegen null geht und hier die makroskopische divergiert. Aber beide Divergenzen lassen sich auf das Nicht-Entkoppeln sehr unterschiedlicher Längenskalen zurückführen. Umso überraschender war, dass trotzdem eine gewisse Universalität überlebt, welche die Renormierungsgruppentheorie erklärt. An der Übergangstemperatur treten Fluktuationen in allen Größenordnungen auf und das System zeigt Selbstähnlichkeit oder geometrisch ausgedrückt eine fraktale Struktur. Durch das Verschwinden einer typischen Längenskala am kritischen Punkt wird die Physik invariant unter Skalentransformationen.

2.3.1 Mikroskopische Landau-Theorie

Aber was ist die Landau-Freie Energie? Trotz ihrer formalen Ähnlichkeit ist sie nicht mit der Gibbs-Freien Energie Γ zu verwechseln, da weder $S(\phi(x))$ konvex ist noch Γ als thermodynamisches Potential mikroskopische Informationen hat. Um die Landau-Freie Energie besser zu verstehen, wollen wir am Beispiel eines Spinmodells mit der Zustandssumme

$$Z = e^{-\beta F} = \sum_{\{S\}} e^{-\beta H(\{S\})} \quad (2.21)$$

einen genaueren Blick darauf werfen, dass die Landau-Theorie das Verhalten des Ordnungsparameters erst nach einer *Grobkörnung* über einen Block $B(x)$ beschreibt (siehe auch [Gol92]). Die Länge B des Blocks liegt zwischen der mikroskopischen Länge a und der Korrelationslänge ξ :

$$a \ll B \leq \xi(T). \quad (2.22)$$

Der grobgekörnte lokale Ordnungsparameter $\phi_B(x)$ ist dann gleich der mittleren Magnetisierung innerhalb des um x zentrierten Blocks. Durch die Grobkörnung gehen die mikroskopischen Details innerhalb der korrelierten Gebiete, die nahe der kritischen Temperatur entstehen, verloren und es werden nur noch die langwelligen Fluktuationen berücksichtigt.

$S[\phi_B(x)]$ ist also gleich der Gibbs-Freien Energie unter der Nebenbedingung, dass das System in einem Zustand ist, der mit dem grobgekörnten Profil des Ordnungsparameters $\phi_B(x)$ verträglich ist. Formal können wir die Landau-Freie Energie schreiben als

$$e^{-\beta S[\phi_B(x)]} = \sum'_{\{S\}} e^{-\beta H(\{S\})}, \quad (2.23)$$

wobei der Strich der Nebenbedingung Rechnung trägt.

Wie hängt also $S[\phi_B(x)]$ mit der Zustandssumme zusammen? Um L zu erhalten, haben wir die Spur über den Teil $\{\bar{S}\}$ der mikroskopischen Freiheitsgrade gebildet, der mit einem *bestimmten* Profil $\bar{\phi}_B(x)$ konsistent ist. Seien $\{S^*\}$ die Konfigurationen, die mit demselben Profil nicht konsistent sind, dann können wir die Summe über alle Mikrozustände in zwei Summen unterteilen

$$\sum_{\{S\}} = \sum_{\{S^*\}} \sum_{\{\bar{S}\}} \quad (2.24)$$

und mit (2.21) folgt

$$Z = \sum_{\{S^*\}} \sum_{\{\bar{S}\}} e^{-\beta H} = \sum_{\{S^*\}} e^{-\beta L\{\bar{\phi}_B(x)\}}. \quad (2.25)$$

Da $\bar{\phi}_B(x)$ eine glatte und auf der mikroskopischen Längenskala langsam veränderliche Funktion ist, können wir die Summe durch ein Pfadintegral approximieren:

$$Z = \int \mathcal{D}\phi e^{-\beta S[\phi]}. \quad (2.26)$$

Dieses Pfadintegral kommt uns zu Recht sehr bekannt vor, denn indem wir die Größen

Ordnungsparameter ϕ	\leftrightarrow	Feld ϕ
Temperatur β^{-1}	\leftrightarrow	Planck-Konstante \hbar
Energiedichte \mathcal{L}	\leftrightarrow	Lagrange-Dichte \mathcal{L}

identifizieren, erkennen wir, dass die Hamiltonfunktion

$$S[\phi] = \int d^3x \mathcal{L}(\phi(x)) = \int d^3x \left(\frac{1}{2} (\partial\phi(x))^2 + \frac{g}{4!} \phi^4 - \frac{m^2}{4} \phi^2 + \frac{3}{8} \frac{m^4}{g} \right) \quad (2.27)$$

formal identisch zur euklidischen Wirkung der ϕ^4 -Theorie eines reellen Skalarfeldes mit Selbstwechselwirkung aus der QFT ist.

2.3.2 Erzeugendes Funktional

Aus der Statistischen Physik kennen wir die Zustandssumme, die in einem diskreten System alle möglichen Zustände mit ihrer Boltzmann-Wahrscheinlichkeit wichtet, und aus der wir alle weiteren thermodynamischen Größen berechnen können. Indem wir einen Quellterm j einfügen, können wir etwas Vergleichbares für Felder definieren:

$$\begin{aligned} Z[j] &= \frac{1}{Z} \int \mathcal{D}\phi \exp \left\{ -\frac{1}{\hbar} \left(S[\phi] - \int d^3x j(x)\phi(x) \right) \right\} \\ &= \frac{1}{Z} \int \mathcal{D}\phi \exp \left\{ -\frac{1}{\hbar} S[\phi, j] \right\}. \end{aligned} \quad (2.28)$$

(2.28) ist das *Erzeugende Funktional* der Green-Funktionen, welche durch Funktionalableitungen aus $Z[j]$ folgen:

$$\begin{aligned} G^{(n)}(x_1, x_2, \dots, x_n) &= \langle \phi(x_1)\phi(x_2) \dots \phi(x_n) \rangle \\ &= \hbar^n \frac{\delta^n}{\delta j(x_1) \delta j(x_2) \dots \delta j(x_n)} Z[j] \Big|_{j=0}. \end{aligned} \quad (2.29)$$

Neben diesem lassen sich noch zwei weitere erzeugende Funktionale konstruieren. Aus der *Freien Energie*

$$W[j] = -\hbar \ln Z[j] \quad (2.30)$$

folgen analog die verbundenen Green-Funktionen oder Korrelationsfunktionen

$$\begin{aligned} G_c^{(n)}(x_1, x_2, \dots, x_n) &= \langle \phi(x_1) \phi(x_2) \cdots \phi(x_n) \rangle_c \\ &= \frac{\delta^n}{\delta j(x_1) \delta j(x_2) \cdots \delta j(x_n)} W[j] \Big|_{j=0}. \end{aligned} \quad (2.31)$$

Mittels einer Legendre-Transformation erhalten wir das erzeugende Funktional der echten Vertex-Funktionen bzw. die *Effektive Wirkung*

$$\Gamma[\phi_c] = W[j] + \int d^3x j(x) \phi_c(x) \quad (2.32)$$

mit dem *klassischen Feld*

$$\phi_c(x) = \langle \phi(x) \rangle_J = -\frac{\delta W[j]}{\delta j(x)}, \quad (2.33)$$

das in der statistischen Physik den Verlauf des gemittelten Ordnungsparameters angibt. Die einfache Funktionalableitung von (2.32) nach dem klassischen Feld ergibt wieder das äußere Feld

$$j(x) = \frac{\delta \Gamma[\phi_c]}{\delta \phi_c}. \quad (2.34)$$

Für den quellfreien Fall $j = 0$ ist analog zu (2.12) der Erwartungswert des Feldes der stationäre Punkt der Effektiven Wirkung:

$$\left. \frac{\delta \Gamma[\phi_c]}{\delta \phi_c(x)} \right|_{j=0} = 0 \quad (2.35)$$

2.4 Intrinsisches Profil der ϕ^4 -Theorie bis zur ersten Ordnung nach Küster

Da die erzeugenden Funktionale nicht analytisch berechenbar sind, führen wir eine *Schleifen-Entwicklung* um das Minimum der Wirkung $S[\phi]$ durch. Die Bedingung

$$\left. \frac{\delta S[\phi]}{\delta \phi} \right|_{\phi=\phi_0} = 0 \quad (2.36)$$

ist identisch zu (2.12): Wir entwickeln also gerade um den Ordnungsparameter der Landau-Theorie. Nach [Küs01] erhalten wir für die effektive Wirkung bis zur ersten Ordnung

$$\Gamma[\phi_c] = \int d^3x \left(\frac{1}{2} (\partial \phi_c)^2 + V(\phi_c) \right) + \frac{\hbar}{2} \ln \det (-\partial^2 + V''(\phi_c)) + \mathcal{O}(\hbar^2). \quad (2.37)$$

Der Ordnungsparameter der ϕ^4 -Theorie ist der Felderwartungswert ϕ_c , der nach (2.35) durch die Bewegungsgleichung

$$\left. \frac{\delta\Gamma[\phi_c]}{\delta\phi_c(z)} \right|_{j=0} = 0 \quad (2.38)$$

gegeben ist, wobei durch antiperiodische Randbedingungen die Grenzfläche senkrecht zur z -Richtung gelegt wird.

2.4.1 Nullte Ordnung: Landau-Theorie

Die effektive Wirkung in nullter Ordnung

$$\Gamma[\phi_c] = \int d^3x \left(\frac{1}{2} (\partial\phi_c)^2 + V(\phi_c) \right) = S[\phi_c] \quad (2.39)$$

liefert mit (2.38) dieselben Ergebnisse wie die Landau-Theorie. Bei antiperiodischen Randbedingungen erhalten wir wieder das Kink-Profil

$$\phi_K = \langle \phi(z) \rangle = v_0 \tanh\left(\frac{m}{2}(z-h)\right). \quad (2.40)$$

2.4.2 Erste Ordnung

Berücksichtigt man die Korrekturen erster Ordnung und führt eine Gradientenentwicklung der Effektiven Wirkung (2.37) durch, erhält man mit der Bewegungsgleichung (2.38) in dieser lokalen Potenzialapproximation das renormierte Grenzflächenprofil

$$\begin{aligned} \phi_{\text{gR}}(z) &= \sqrt{\frac{3m_{\text{R}}}{u_{\text{R}}}} \chi_{\text{gR}}(z) \\ &= \sqrt{\frac{3m_{\text{R}}}{u_{\text{R}}}} \left\{ \chi_{\text{gR}}^{(0)} t_{\text{R}} + \frac{u_{\text{R}}}{8\pi} \chi_{\text{gR}}^{(1)} t_{\text{R}} + \mathcal{O}(u_{\text{R}}^{(2)}) \right\} \end{aligned} \quad (2.41)$$

mit der dimensionslosen Kopplung

$$u_0 = \frac{g}{m} \quad (2.42)$$

(siehe [Küs01] oder in verkürzter Darstellung [Mül04]). Der Parameter h im renormierten Argument

$$t_{\text{R}} = \frac{m_{\text{R}}}{2} (z-h) \quad (2.43)$$

gibt den Nulldurchgang des Grenzprofils, d.h. den Ort der Grenzfläche an. Das Treelevel-Profil $\chi_{\text{gR}}^{(0)}$ reproduziert wieder den tanh-Kink aus der Landau-Theorie

$$\chi_{\text{gR}}^{(0)}(t_{\text{R}}) = \tanh(t_{\text{R}}) \quad (2.44)$$

und das 1-Loop-Profil hat folgende Form:

$$\chi_{\text{gR}}^{(1)}(t_{\text{R}}) = \begin{cases} \chi_{\text{gR}<}^{(1)}(t_{\text{R}}) & \text{für } |t_{\text{R}}| \leq \text{arsinh} \frac{1}{\sqrt{2}} \\ \chi_{\text{gR}>}^{(1)}(t_{\text{R}}) & \text{für } |t_{\text{R}}| \geq \text{arsinh} \frac{1}{\sqrt{2}} \end{cases} \quad (2.45)$$

mit

$$\begin{aligned} \chi_{\text{gR}<}^{(1)}(t_{\text{R}}) &= \frac{1}{12} t_{\text{R}} \text{sech}^2 t_{\text{R}} + \frac{2}{9} \sinh t_{\text{R}} \cosh t_{\text{R}} - \frac{2}{3} \tanh t_{\text{R}} \\ \chi_{\text{gR}>}^{(1)}(t_{\text{R}}) &= \frac{1}{12} t_{\text{R}} \text{sech}^2 t_{\text{R}} + \frac{2}{9} \sinh t_{\text{R}} \cosh t_{\text{R}} - \frac{2}{3} \tanh t_{\text{R}} \\ &\quad - \frac{1}{12} \text{sech}^2 t_{\text{R}} \text{artanh} \left(\frac{\sqrt{-\frac{1}{2} + \sinh^2 t_{\text{R}}}}{\sinh t_{\text{R}}} \right) \\ &\quad - \sinh t_{\text{R}} \sqrt{-\frac{1}{2} + \sinh^2 t_{\text{R}}} \left[\frac{2}{9} - \frac{1}{2} \text{sech}^2 t_{\text{R}} \right] \end{aligned} \quad (2.46)$$

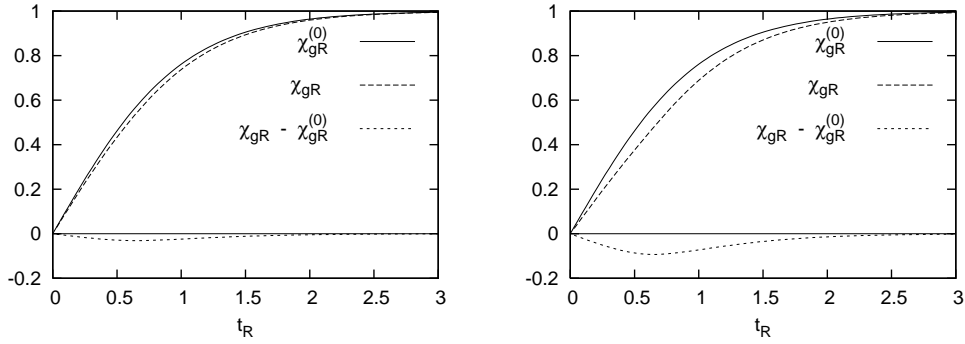


Abbildung 2.4: Das Treelevel-Profil $\chi_{\text{gR}}^{(0)}$ und der Einfluss der 1. Ordnung für die Kopplungen $u_{\text{R}} = 5$ (links) und $u_{\text{R}} = 15$ (rechts).

Abbildung 2.4 zeigt den Einfluss der 1. Ordnung auf die Profilform. Der 1-Loop-Beitrag $\chi_{\text{gR}} - \chi_{\text{gR}}^{(0)}$ nimmt für größere Kopplungen u_{R} zwar zu, der qualitative Verlauf der Funktion ändert sich aber kaum. Das Profil wird durch das Berücksichtigen weiterer Fluktuationen breiter und die Grenzflächendicke, die wir noch genau betrachten werden, wird im Vergleich zur klassischen Lösung vergrößert.

In der Sattelpunktsentwicklung werden die Fluktuationen so nach Ordnungen von \hbar geordnet, dass das Treelevel auf den tanh-Kink der Landau-Theorie führt. In der Quantenfeldtheorie entspricht dies einer Entwicklung nach Quantenfluktuationen um die klassische Theorie. Die folgende Tabelle zeigt, wie eng die Statistische Physik mit der QFT verknüpft ist (siehe auch [LB91, LBMB04]):

Statistische Physik		QFT
Ordnungsparameter	$\phi(x)$	Feld
Mittel des Ordnungsparameters	$\phi_c(x)$	klassisches Feld, Vakuumerwartungswert
Korrelationslänge	$\xi = m^{-1}$	inverse Masse
Kanonische Zustandssumme	$Z[j]$	Erzeugendes Funktional der Green-Funktionen
Freie Energie	$W[j]$	Erzeugendes Funktional der ver- bundenen Green-Funktionen
Gibbs-Freie Energie	$\Gamma[\phi_c]$	Effektive Wirkung
Landau-Theorie		Klassischer Grenzfall
thermische Fluktuationen		Quantenfluktuationen

2.5 Grenzflächenfluktuationen

Wir haben gesehen, dass die Landau-Theorie den Ordnungsparameter erst nach einer Grobkörnigkeit beschreibt, bei der die mikroskopischen Fluktuationen $\lambda < a$ verloren gehen. Außerdem berücksichtigt sie als Mean-Field-Theorie nur Konfigurationen mit einem einheitlichen Ordnungsparameter und vernachlässigt Fluktuationen mit Wellenlängen $\lambda > B_{\text{intr}}$, innerhalb dessen die Wechselwirkungen durch ein mittleres Feld beschrieben werden können.

Die ϕ^4 -Theorie beschreibt alle Fluktuationen des Ordnungsparameters, lässt sich aber nicht exakt analytisch lösen. In der Sattelpunktsentwicklung werden die thermischen Fluktuationen bis zur Ordnung $\mathcal{O}(\hbar)$ betrachtet. Die lokale Potenzial-Approximation bewirkt, dass das berechnete Profil sich wie ein Mean-Field-Profil verhält. Insgesamt berücksichtigen wir also wieder nur Fluktuation der Grenzfläche zwischen

$$a < \lambda < B_{\text{intr}} \sim \xi. \quad (2.47)$$

Wir wissen, dass die Mean-Field-Näherung am kritischen Punkt nicht gültig ist, da dort Fluktuationen auf allen Größenskalen auftreten. Aber es treten auch schon lange bevor der kritischen Punkt erreicht wird langwellige Fluktuationen der Grenzfläche auf, die wir bisher nicht erfasst haben. Im folgenden Kapitel werden wir deshalb ein Modell zur Behandlung dieser Fluktuationen entwickeln und mit den bisherigen Ergebnissen zu einer vollständigen Theorie verknüpfen.

3 Kapillarwellen-Theorie und Faltungsnäherung

3.1 Kapillarwellen-Theorie

Die auf Buff, Lovett und Stillinger [BLS65] zurückgehende Kapillarwellen-Theorie beschreibt die langwelligigen Fluktuationen der Grenzfläche, die viel größer als die Korrelationslänge sind. In diesem Bild gibt es keinen kontinuierlichen Übergang des Ordnungsparameters zwischen den Phasen sondern eine scharfe Grenzfläche, die man sich als schwingende Membran vorstellen kann. Es werden also keine Überhänge, Bläschen oder ähnliches berücksichtigt. Durch thermische Fluktuationen wird die Grenzfläche deformiert und es entsteht im Mittel trotzdem ein kontinuierliches Profil mit endlicher Dicke.

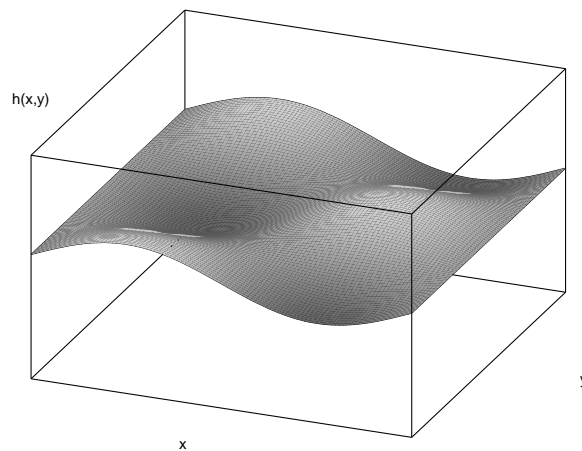


Abbildung 3.1: Schwingende Grenzflächenmembran.

Betrachten wir die Fluktuationen der Grenzfläche in der Monge-Darstellung $z = h(x, y)$. Die Freie Energie \mathcal{H}_{KW} der Kapillarwelle lässt sich berechnen, indem wir die Arbeit betrachten, die gegen die Oberflächenspannung $\tau = \frac{\sigma}{\beta}$ verrichtet wird. Aus der Differenz des Systems mit Fluktuationen und dem ungestörten System erhalten

wir

$$\begin{aligned}\beta\mathcal{H}_{\text{KW}} &= \beta\tau (A_{h(x,y)} - A_{h=\text{konst}}) \\ &= \sigma \int dx dy \sqrt{1 + (\nabla h(x,y))^2} - \sigma \int dx dy.\end{aligned}\quad (3.1)$$

Für eine formale Herleitung aus der ϕ^4 -Theorie siehe auch [Saf94]. Da wir langwellige Fluktuationen mit kleinen Amplituden betrachten, können wir (3.1) entwickeln und erhalten

$$\beta\mathcal{H}_{\text{KW}} \approx \frac{\sigma}{2} \int dx dy (\nabla h(x,y))^2. \quad (3.2)$$

Durch Übergang in den Fourier-Raum lässt sich die Wahrscheinlichkeit $P(h)$, dass die Grenzfläche im Punkt (x,y) die z -Koordinate h hat, bestimmen. $P(h)$ genügt der Gauß-Verteilung

$$P(h) = \frac{1}{\sqrt{2\pi s}} e^{-\frac{h^2}{2s^2}} \quad (3.3)$$

mit der Varianz

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

die die durch Fluktuationen entstandene endliche Grenzflächendicke beschreibt. Aufgrund der logarithmischen Divergenz des Integrals in (3.4) für $q \rightarrow 0$ und $q \rightarrow \infty$ müssen wir zwei Cutoffs einführen. Der untere folgt auf natürliche Weise aus der Endlichkeit des Systems und beschränkt die Moden auf $q > \frac{2\pi}{L}$. Im thermodynamischen Limes $L \rightarrow \infty$ tritt die Divergenz wieder auf. Diese Infrarot-Divergenz ist aber physikalisch: Da wir die Gravitation nicht berücksichtigt haben, kostet die Nullmode – das Verschieben der Grenzfläche ohne Deformation – aufgrund der Translationsinvarianz keine Energie. Der obere Cutoff $q < \frac{2\pi}{B_{\text{KW}}}$ ist weniger eindeutig und muss aus der Kapillarwellen-Näherung motiviert werden. Wir sind davon ausgegangen, dass die Grenzfläche ein scharfer Übergang zwischen den Phasen ist und alle Effekte sich in einem einzigen makroskopischen Parameter, der Oberflächenspannung, zusammenfassen lassen. Diese Annahmen sind natürlich nur bis zu einer gewissen Größenskala B_{KW} vertretbar, die etwa der Korrelationslänge entsprechen sollte. Innerhalb der Kapillarwellen-Theorie werden also Fluktuationen der Wellenlängen

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

berücksichtigt und es folgt für die Grenzflächendicke

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

Das Profil der Kapillarwellen-Theorie in einer Momentaufnahme trennt scharf zwischen den Phasen v_0 und $-v_0$:

$$\phi_g(z-h) = v_0(-1 + 2\Theta(z-h)) = \begin{cases} v_0, & \text{wenn } z > h \\ -v_0, & \text{wenn } z < h. \end{cases} \quad (3.7)$$

Durch Mittelung über die fluktuierende Membran erhalten wir das kontinuierliche Profil

$$\begin{aligned} \phi_{\text{KW}}(z) &= \int_{-\infty}^{\infty} dh \phi_g P(h) = \int_{-\infty}^{\infty} dh v_0 (-1 + 2\Theta(z-h)) \frac{1}{\sqrt{2\pi s}} e^{-\frac{h^2}{2s^2}} \\ &\stackrel{h'=\frac{h}{\sqrt{2s}}}{=} 0 + \frac{2}{\pi} v_0 \int_0^{\infty} dh' \Theta(z - \sqrt{2s}h') e^{-h'^2} = \frac{2}{\pi} v_0 \int_0^{\frac{z}{\sqrt{2s}}} dh' e^{-h'^2} \\ &= v_0 \operatorname{erf}\left(\frac{z}{\sqrt{2s}}\right), \end{aligned} \quad (3.8)$$

welches sich nicht qualitativ vom tanh-Profil der Landau-Theorie unterscheidet.

3.2 Faltungsnäherung

Wir haben bisher zwei Theorien zur Beschreibung von Grenzflächen entwickelt, die jeweils Fluktuationen nur innerhalb eines gewissen Bereichs beschreiben können. Zusammen können sie sich aber so ergänzen, dass sie alle Fluktuationen berücksichtigen. Unter der Annahme, dass die Fluktuationen der Theorien nicht miteinander wechselwirken, können wir sie über eine Faltung verknüpfen. Der kontinuierliche Phasenübergang ϕ_g findet mit der Wahrscheinlichkeit $P(h)$ aus der Kapillarwellentheorie am Punkt (x,y) in der Höhe $h(x,y)$ statt und es folgt für das Gesamtprofil

$$c(z) = \langle \phi_g(z-h) \rangle = \int dh \phi_g(z-h) P(h) = \phi_g * P(z) \quad (3.9)$$

Die Standardabweichung der Kapillarwellen verbreitert das intrinsische tanh-Profil und überlagert die Effekte der Schleifen-Korrekturen 1. Ordnung. Im Grenzfall großer Standardabweichungen $s \rightarrow \infty$ erscheint das Grenzflächenprofil wieder als Stufe und das Ergebnis der Kapillarwellen-Theorie wird reproduziert. Für $s \rightarrow 0$ ist $P(h)$ die Delta-Funktion und $c(z)$ geht in das intrinsische Grenzflächenprofil über. Wir können also aufgrund der Ähnlichkeit der Profilformen nicht erwarten zwischen den Gültigkeitsbereichen der Landau- und Kapillarwellentheorie unterscheiden zu können.

Die Faltungsnäherung mag zunächst etwas zu einfach erscheinen, aber Michael Köpf hat in seiner Diplomarbeit [Köp08] in einer Störungsrechnung mittels der effektiven Wirkung das Profil der Grenzfläche in 1-Schleifen-Ordnung aus der ϕ^4 -Theorie bestimmt und konnte die aus der Kapillarwellen-Theorie vorhergesagte logarithmische Abhängigkeit der Grenzflächendicke von der Systemgröße zeigen.

4 Grenzflächendicke

Wie wir im letzten Kapitel gesehen haben, können wir aufgrund der qualitativen Ähnlichkeit des Tangens-Hyperbolicus zur Fehlerfunktion nicht anhand des Grenzflächenprofils zwischen dem intrinsischen und dem makroskopischen Regime unterscheiden und den Übergang von der Landau- zur Kapillarwellentheorie beobachten. Stattdessen betrachten wir die Dicke der Grenzfläche, die sich in beiden Theorien wesentlich unterscheidet: Die Dicke des intrinsischen Profils ist konstant, hingegen skaliert sie nach Gleichung (3.6) im Gültigkeitsbereich des Kapillarwellen-Modells linear mit dem Logarithmus der Systemlänge.

Es existiert keine eindeutige Definition der Grenzflächendicke, aber in [Mül04] findet sich ein ausführlicher Vergleich möglicher Definitionen. In Übereinstimmung mit der dort getroffenen Wahl definieren wir die Grenzflächendicke als zweites Moment einer Verteilung p , die entweder proportional zu dem Gradienten oder dem Quadrat des Gradienten des Profils ist, und nehmen eine Umskalierung der Parameter vor. Mit $v_0 = 1$ gehorcht das Grenzflächenprofil den Randbedingungen

$$c(z \rightarrow \pm\infty) = \pm 1 \quad (4.1)$$

und wir gehen zu den dimensionslosen Variablen

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

über, sodass das Profil

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

nur noch von dem Parameter s abhängig ist.

4.1 Definitionen

Es bietet sich an, die Grenzflächendicke als zweites Moment einer Wahrscheinlichkeitsverteilung p zu definieren, die möglichst gut die Profilform wiedergibt:

$$w^2 = \langle z^2 \rangle = \int dz z^2 p(z). \quad (4.4)$$

Wir werden im folgenden sowohl den Gradient als auch das Quadrat des Gradienten des Profils für p betrachten. Beide Definitionen zeigen eine intrinsische Grenzflächendicke und den linearen Anstieg im Kapillarwellenregime, haben aber unterschiedliche Vorteile.

4.1.1 Gradient

Diese Definition wird häufig verwendet, da der Gradient die Form des Profils gut berücksichtigt und bei numerischen Simulationen stabiler als das Gradientenquadrat ist. Allerdings muss das Profil monoton steigen, da ein negatives p innerhalb der Wahrscheinlichkeitsinterpretation keinen Sinn macht. Für die normierte Verteilung folgt

$$\begin{aligned} p(z) &= \frac{1}{2}c'(z) = \frac{1}{2} \left[\tanh(z) * \frac{1}{\sqrt{2\pi s}} e^{-\frac{z^2}{2s^2}} \right]' \\ &= \frac{1}{2 \cosh^2(z)} * \frac{1}{\sqrt{2\pi s}} e^{-\frac{z^2}{2s^2}} \end{aligned} \quad (4.5)$$

und mittels Fourier-Transformation lässt sich die Grenzflächendicke zu

$$w^2 = \langle z^2 \rangle = \frac{\pi^2}{12} + s^2 \quad (4.6)$$

berechnen. Die Gesamtdicke des Grenzflächenprofils ergibt sich also einfach aus Summation der intrinsischen und der Kapillarwellen-Dicke

$$w^2 = w_{\text{intr}}^2 + w_{\text{KW}}^2. \quad (4.7)$$

Dieses Ergebnis lässt sich auch direkt aus der Feldtheorie herleiten [Köp08] und zeigt die Gültigkeit der Faltungsnäherung.

4.1.2 Gradientenquadrat

Das Quadrat des Gradienten ist proportional zur Energiedichte des intrinsischen Profils und liefert eine immer positive Wahrscheinlichkeitsverteilung. Für die normierten Dicken erhalten wir:

$$\begin{aligned} w_{\text{intr}}^2 &= \int dz z^2 \frac{3}{4} \frac{1}{\cosh^4 z} = \frac{\pi^2 - 6}{12} \\ w_{\text{KW}}^2 &= \int dh h^2 \frac{1}{\sqrt{\pi s}} e^{-h^2/s^2} = \frac{s^2}{2} \end{aligned} \quad (4.8)$$

Aufgrund der Nichtlinearität der Definition gilt die Summation

$$w_2^2 \approx w_{\text{intr}}^2 + w_{\text{KW}}^2 \quad (4.9)$$

nur näherungsweise. Der Fehler ist maximal für $s \sim 1$, aber stets unter 3% und sehr klein für große bzw. kleine s [Mül04].

Teil II

Monte-Carlo-Simulation

5 Ziel der Simulation

5.1 Theoretische Vorhersagen

Im ersten Teil der Arbeit haben wir aus der Landau- und Kapillarwellen-Theorie ein Modell zur Beschreibung kritischer Grenzflächen entwickelt. Wir wollen kurz die Vorhersagen, die in diesem Modell getroffen werden konnten, zusammenfassen.

- Die Landau-Theorie beschreibt als Mean-Field-Theorie Fluktuationen zwischen der Gitterkonstanten a und der Korrelationslänge ξ

$$a < \lambda < B_{\text{intr}} \sim \xi \quad (5.1)$$

und liefert für die Grenzschicht das Kink-Profil

$$\phi_{\text{G}} = v_0 \tanh\left(\frac{1}{2\xi}(z - h)\right) \quad (5.2)$$

mit der konstanten intrinsischen Dicke

$$w_{\text{intr}}^2 = c_{\text{intr}}\xi^2. \quad (5.3)$$

Der Faktor c_{intr} hängt ausschließlich von der Definition der Grenzfläche über die Gewichtsfunktion p ab und beträgt nach (4.6) und (4.8) unter Berücksichtigung der Umskalierung (4.2)

$$c_{\text{intr}} = \begin{cases} \frac{\pi^2-6}{3} & \text{für } p \propto \phi'_{\text{G}}{}^2 \\ \frac{\pi^2}{3} & \text{für } p \propto \phi'_{\text{G}}. \end{cases} \quad (5.4)$$

Erweitert man die Theorie um die erste Ordnung der Schleifen-Entwicklung, vergrößern die Fluktuationen höherer Ordnung die intrinsische Dicke.

- Die Kapillarwellen-Theorie behandelt Fluktuationen

$$\xi \sim B_{\text{KW}} < \lambda < L \quad (5.5)$$

der schwingenden Membran zwischen der Korrelations- und der Systemlänge. Diese erzeugen das Profil

$$\phi_{\text{KW}} = v_0 \text{erf}\left(\frac{z}{\sqrt{2}s}\right) \quad (5.6)$$

mit der Dicke

$$w_{\text{KW}}^2 = A_{\text{KW}} \log_2 \frac{L}{B_{\text{KW}}}, \quad (5.7)$$

welche linear mit dem Logarithmus der Systemgröße anwächst. Der Faktor A_{KW} ist von der Definition der Grenzflächendicke abhängig

$$A_{\text{KW}} = \begin{cases} \frac{\ln 2}{4\pi\sigma} & \text{für } p \propto \phi'_G{}^2 \\ \frac{\ln 2}{2\pi\sigma} & \text{für } p \propto \phi'_G. \end{cases} \quad (5.8)$$

- Innerhalb der Faltungsnäherung erhalten wir die Gesamtdicke aus der Summe von w_{intr} und w_{KW}

$$\begin{aligned} w^2 &= w_{\text{intr}}^2 + w_{\text{KW}}^2 \\ &= c_{\text{intr}}\xi^2 + A_{\text{KW}} \log_2 \frac{L}{B_{\text{KW}}}. \end{aligned} \quad (5.9)$$

Dies gilt für $p \propto \phi'_G$ exakt und für $p \propto \phi'_G{}^2$ in guter Näherung.

Die Grenzflächendicke ist über die Korrelationslänge mit der Temperatur verknüpft. Um die Ergebnisse für verschiedene Simulationsparameter besser vergleichen zu können, bringen wir (5.9) auf eine temperaturunabhängige Form, indem wir die Größen in Einheiten der Korrelationslänge ausdrücken. Für die universelle Dicke \hat{w}^2 folgt dann:

$$\begin{aligned} \hat{w}^2 &= \left(\frac{w}{2\xi} \right)^2 = \frac{c_{\text{intr}}}{4} + \frac{c_{\text{KW}} \ln 2}{8\pi\sigma\xi^2} \log_2 \frac{\hat{L}}{\hat{B}_{\text{KW}}} \\ &= \hat{w}_{\text{intr}}^2 + \hat{A}_{\text{KW}} \log_2 \frac{\hat{L}}{\hat{B}_{\text{KW}}}. \end{aligned} \quad (5.10)$$

5.2 Ziel und Methode

Im folgenden Teil der Arbeit wollen wir die in der Theorie getroffenen Vorhersagen zur Grenzflächendicke anhand einer Gittersimulation überprüfen. Die Landau- und Kapillarwellen-Theorie berücksichtigen ausschließlich bestimmte Fluktuationen und unterscheiden zwischen einem intrinsischen und makroskopischen Regime. Bei der Simulation der Grenzfläche werden aber natürlich alle Fluktuationen auftreten. Um also die Gültigkeit der Theorien überprüfen zu können, müssen wir die verschiedenen Fluktuationen trennen.

Wir erreichen eine Hochpass-Filterung, indem wir das System $L \times L \times Z$ in Blöcke der Größe $B \times B \times Z$ unterteilen und jeden Block als eigenes System auffassen. Bei der Berechnung der Grenzflächendicke w_B^2 berücksichtigen wir dann nur Wellenlängen

$\lambda < B$. Umgekehrt ist es auch möglich zunächst über die Blöcke zu mitteln und dann das System der Größe $\frac{L}{B} \times \frac{L}{B} \times Z$ zu betrachten. Bei der Mittelung gehen die Fluktuationen $\lambda < B$ verloren und wir können die Vorhersage der Kapillarwellen-Theorie zur Verteilung der Grenzflächenpositionen $P^B(h)$ bei variablem unteren Cutoff B überprüfen.

Durch dieses Blocking-Verfahren unterteilen wir die Grenzflächendicke (5.9) effektiv in zwei Teile

$$\begin{aligned} w^2 &= w_{\text{intr}}^2 + A_{\text{KW}} \log_2 \frac{L}{B_{\text{KW}}} \\ &= \underbrace{w_{\text{intr}}^2 + A_{\text{KW}} \log_2 \frac{B}{B_{\text{KW}}}}_{\text{Dicke } w_B^2} + \underbrace{A_{\text{KW}} \log_2 \frac{L}{B}}_{\text{Varianz von } P^B(3.6)}. \end{aligned} \quad (5.11)$$

Da das Verhalten am kritischen Punkt universell ist, hat Melanie Müller genau diese Untersuchungen der Grenzfläche mit einem Ising-Modell gemacht, das in derselben Universalitätsklasse wie die ϕ^4 -Theorie liegt [Mül04, MM05]. Sie konnte die Vorhersagen der Kapillarwellen-Theorie bestätigen, doch überraschenderweise zeigte sich keine intrinsische Grenzflächendicke, die mit der Landau-Theorie in Einklang zu bringen war.

Die Vermutung liegt nahe, dass die Abweichungen auf Ising-Artefakte zurückzuführen sind, welche insbesondere bei kleinen Blockgrößen einen großen Einfluss haben. Aus diesem Grund werden wir die ϕ^4 -Theorie direkt auf dem Gitter simulieren und können zudem durch die Variation der Parameter den Übergang vom Ising-Modell zur ϕ^4 -Theorie beleuchten.

6 Messverfahren

Die Definitionen und Bezeichnungen sind weitgehend identisch zu den von Melanie Müller gewählten, damit sich die Ergebnisse gut vergleichen lassen. Aufgrund der unterschiedlichen Zählweisen von C++ und Fortran gibt es kleinere Abweichungen bei der Numerierung der Größen: Um die Konsistenz mit dem Programm zu wahren, wird das erste Element immer mit 0 bezeichnet und die für Ising-Programm eingeführten Zwischengitterebenen werden nur indirekt verwendet.

6.1 Blocking und lokale Magnetisierungsprofile

Unser Ziel ist es, die Grenzfläche auf verschiedenen Größenskalen zu untersuchen und die Fluktuationen nach ihrer Wellenlänge zu trennen. Aus diesem Grund unterteilen wir das Gitter der Größe $L \times L \times Z$ in gleich große Blöcke mit der quadratischen Grundfläche $B \times B$ und der vollen Länge Z . Damit sich das Blocking effektiv in die numerische Simulation implementieren lässt, werden Potenzen von zwei als Block- und Systemgrößen verwendet. Anschließend können wir für jeden Block i ein *lokales Magnetisierungsprofil* $m_i^B(z)$ als den über die z -Scheiben gemittelten Wert des Feldes definieren:

$$m_i^B(z) = \frac{1}{B^2} \sum_{x,y=0}^{B-1} \phi(x, y, z). \quad (6.1)$$

Die Position der Grenzfläche im Gitter ist nicht fest, sondern gehorcht einer Normalverteilung. Bevor wir deshalb die lokalen Magnetisierungsprofile m^B einer Blockgröße innerhalb einer Konfiguration als auch über alle Konfigurationen mitteln können, müssen wir die Grenzfläche an die gleiche Stelle schieben, da ansonsten die Mittelung null ergäbe. Aus Symmetriegründen bietet sich die Mitte $z = \frac{Z}{2}$ des Systems an. Außerdem orientieren wir das Profil so, dass es von negativen zu positiven Werten läuft.

6.1.1 Grenzflächenposition

Notwendigerweise brauchen wir zunächst eine geeignete Methode zur Bestimmung der Grenzflächenposition. Hierzu verwenden wir das von Prof. G. Münster vorgeschlagene und in [Mül04] beschriebene translationsinvariante *Rand-Schiebe-Verfahren*. Dabei wird sukzessive die Stelle der antiperiodischen Randbedingung z_{ap}

durch das System gefahren und das Integral über das Magnetisierungsprofil m_{tot} betrachtet:

$$m_{\text{tot}} = \sum_{z=0}^{Z-1} m_i^B(z). \quad (6.2)$$

Aufgrund der antiperiodischen Randbedingung ändern die Ebenen, die passiert werden, ihr Vorzeichen und tragen wie folgt zu m_{tot} bei:

$$m_{\text{tot}}(z_{\text{ap}}) = \sum_{z=0}^{Z-1} m_i^B(z) - \sum_{z=0}^{z_{\text{ap}}} 2m_i^B(z). \quad (6.3)$$

Das bedeutet aber auch, dass der Betrag des Integrals genau dann maximal wird, wenn z_{ap} auf der Grenzfläche liegt, und wir können dies als Definition verwenden:

$$|m_{\text{tot}}(z_i^B)| = \max \{|m_{\text{tot}}(z_{\text{ap}})|, z_{\text{ap}} = 0, \dots, Z-1\}. \quad (6.4)$$

Für den Fall, dass entartete Maxima auftreten und die Grenzflächenposition nicht eindeutig bestimmt werden kann, wird zufällig eine der Grenzflächenpositionen ausgewählt.

6.1.2 Gemittelte Profile und Gradientenanalyse

Um die im System auftretenden Fluktuationen zu kontrollieren fassen wir die verschobenen Profile innerhalb einer MC-Konfiguration nun für jede Blockgröße zu einem gemittelten Profil zusammen

$$m_c^B(z) = \frac{1}{n_B} \sum_{i=0}^{n_B-1} m_i^B(z)|_{\text{verschoben}}. \quad (6.5)$$

Diese sind die für die Fehlerabschätzung relevanten primären Observablen der Simulation, wobei $n_B = (\frac{L}{B})^2$ die Anzahl der Blocks der Größe B innerhalb einer Konfiguration sind. Für die Gradientenanalyse interessant sind jedoch die über die Konfigurationen aller Simulationen und Replica gemittelten Profile

$$m^B(z) = \langle m_c^B(z) \rangle. \quad (6.6)$$

Zur Berechnung der Grenzflächendicke definieren wir das *normierte Gradienten-Quadrat* für das Profil $m^B(z)$, $z = 0, 2, \dots, Z-1$

$$p^B(z) = \frac{1}{N} [m^B(z+1) - m^B(z)]^2 \quad (6.7)$$

mit der Normierung

$$N = \sum_{z=0}^{Z-2} [m^B(z+1) - m^B(z)]^2 \quad (6.8)$$

und den *normierten Gradienten*

$$p^B(z) = \frac{1}{N} |m^B(z+1) - m^B(z)| \quad (6.9)$$

mit

$$N = \sum_{z=0}^{Z-2} |m^B(z+1) - m^B(z)|. \quad (6.10)$$

Bei kleinen Blockgrößen ist das Profil nicht monoton steigend. Um zu verhindern, dass die Gewichtsfunktion im Fall der Definition über den Gradienten negativ wird, wurde in (6.9) der Betrag gesetzt.

Bevor wir die Grenzflächendicke über das zweite Moment des (quadrierten) Gradienten berechnen können, müssen wir das Koordinatensystem so verschieben, dass die Grenzflächenposition bei 0 liegt. Damit geht auch das erste Moment der Gewichtsfunktion p^B

$$\left\langle -\frac{Z}{2} + 1 + z \right\rangle_p = \sum_{z=0}^{Z-2} \left(-\frac{Z}{2} + 1 + z\right) p^B\left(-\frac{Z}{2} + 1 + z\right) \quad (6.11)$$

gegen null und das zweite Moment liefert das Quadrat der Grenzflächendicke

$$\begin{aligned} w_B^2 &= \left\langle \left(-\frac{Z}{2} + 1 + z\right)^2 \right\rangle_p - \left\langle -\frac{Z}{2} + 1 + z \right\rangle_p^2 \\ &= \sum_{z=0}^{Z-2} \left[\left(-\frac{Z}{2} + 1 + z\right)^2 p^B\left(-\frac{Z}{2} + 1 + z\right) \right] - \left\langle -\frac{Z}{2} + 1 + z \right\rangle_p^2 \end{aligned} \quad (6.12)$$

6.2 ϕ^4 -Theorie auf dem Gitter

Um das System numerisch simulieren zu können, müssen wir eine diskrete Formulierung der kontinuierlichen ϕ^4 -Theorie auf dem Gitter entwickeln. Ausgehend von der Wirkung

$$S[\phi] = \int d^3x \left\{ \frac{1}{2} (\partial\phi)^2 + \frac{g}{4!} \phi^4 + \frac{m^2}{2} \phi^2 \right\} \quad (6.13)$$

ersetzen wir das kontinuierliche Feld ϕ durch eines, das nur auf den Punkten x des kubischen Gitters mit den Abständen a definiert ist. Dann wird aus dem dreidimensionalen Integral $\int d^3x$ die Summe $\sum_x a^3$ und wir definieren die Ableitung auf dem Gitter als den Differenzoperator

$$\Delta\phi_x = \frac{1}{a} (\phi_{x+\hat{\mu}} - \phi_x), \quad (6.14)$$

wobei $\hat{\mu}/a$ der Einheitsvektor in die mit μ bezeichnete Richtung ist. Dann können wir für die Gitter-Wirkung schreiben:

$$S[\phi] = \frac{1}{2} \sum_x a^3 \{ \Delta_\mu \phi_x \Delta_\mu \phi_x + m^2 \phi_x^2 \} + \frac{g}{4!} \sum_x a^3 \phi_x^4. \quad (6.15)$$

Für numerische Untersuchungen ist es sinnvoll $S[\phi]$ umzuschreiben. Mit den Größen

$$\sqrt{a}\phi = \sqrt{2\kappa}\phi_x, \quad a^2 m^2 = \frac{1-2\lambda}{\kappa} - 6, \quad g = \frac{6\lambda}{\kappa^2 a} \quad (6.16)$$

vereinfacht sich (6.15) zu

$$\begin{aligned} S[\phi] &= \int d^3x \left\{ \frac{1}{2} (\partial\phi_x)^2 + \frac{g}{4!} \phi_x^4 + \frac{m^2}{2} \phi_x^2 \right\} \\ &= \sum_x a^3 \left\{ \frac{\kappa}{a} \sum_{\mu=1}^3 \left(\frac{1}{a} (\phi_{x+\hat{\mu}} - \phi_x) \right)^2 + \frac{\lambda \phi_x^4}{a^3} + (1-2\lambda-6\kappa) \frac{\phi_x^2}{a^3} \right\} \\ &= \sum_x \left\{ 3\kappa \phi_x^2 + 3\kappa \phi_{x+\hat{\mu}}^2 - 6\kappa \phi_x^2 \right\} \\ &\quad + \sum_x \left\{ -2\kappa \sum_{\mu=1}^3 \phi_{x+\hat{\mu}} \phi_x + \lambda \phi_x^4 + \phi_x^2 - 2\lambda \phi_x^2 \right\} \\ &= \sum_x \left\{ -2\kappa \sum_{\mu=1}^3 \phi_{x+\hat{\mu}} \phi_x + \lambda (\phi_x^4 - 2\phi_x^2 + 1) - \lambda + \phi_x^2 \right\} \\ &= \sum_x \left\{ -2\kappa \sum_{\mu=1}^3 \phi_{x+\hat{\mu}} \phi_x + \phi_x^2 + \lambda (\phi_x^2 - 1)^2 - \lambda \right\} \end{aligned} \quad (6.17)$$

Da das letzte λ losgelöst vom Feld ϕ auftaucht, wird es bei der Normierung verschwinden und kann bereits jetzt aus der Wirkung entfernt werden. Somit erhalten wir:

$$S[\phi] = \sum_x \left\{ -2\kappa \sum_{\mu=1}^3 \phi_{x+\hat{\mu}} \phi_x + \phi_x^2 + \lambda (\phi_x^2 - 1)^2 \right\} \quad (6.18)$$

7 Prinzipien der Gleichgewichts-MC-Simulation

Im Folgenden soll ein kurzer Überblick über die Theorie der Monte-Carlo-Simulationen gegeben werden, auf Grundlage dessen anschließend der Algorithmus für die numerische Simulation hergeleitet wird. Ausführlichere Darstellungen finden sich zum Beispiel in [NB99], [BDFN92] und [Ber04].

7.1 Übergangswahrscheinlichkeiten

Wir betrachten unser System, das durch den Hamiltonian H beschrieben wird, im kanonischen Ensemble. Das Wärmebad ermöglicht einen Energieaustausch und wirkt wie eine schwache Störung des Hamiltonians, die das System regelmäßig von einen in den anderen Zustand stößt. Dieser Effekt lässt sich in den numerischen Rechnungen berücksichtigen, indem man eine Regel für die Dynamik des Systems aufstellt. Wir definieren die *Übergangsrates* $R(\mu \rightarrow \nu)$ so, dass $R(\mu \rightarrow \nu)dt$ die Wahrscheinlichkeit ist, dass das System aus dem Ursprungszustand μ nach der Zeit dt in den Zustand ν übergegangen ist und fordern weiterhin, dass $R(\mu \rightarrow \nu)$ zeitunabhängig ist. Üblicherweise beschränkt sich unser Wissen auf diese Übergangsrates, weshalb wir, auch wenn wir den Anfangszustand unseres Systems exakt kennen, schon nach kurzer Zeit nicht mehr sagen können, in welchem der sehr vielen möglichen Zustände sich das System befindet. An dieser Stelle beginnt die statistische Behandlung unseres Problems. Wir definieren einen Satz von Gewichten $w_\mu(t)$, die die Wahrscheinlichkeit angeben, dass sich das System zur Zeit t im Zustand μ befindet. Die Statistische Mechanik befasst sich mit eben diesen Gewichten, und sie sind alles, was wir über den Zustand unseres Systems sagen können. Die Änderung der Wahrscheinlichkeit das System in einem bestimmten Zustand μ zu finden, ergibt sich aus der Wahrscheinlichkeit aus einem anderen Zustand ν in diesen zu wechseln minus der Wahrscheinlichkeit den Zustand μ wieder zu verlassen. Dies führt auf die *Mastergleichung*

$$\frac{dw_\mu}{dt} = \sum_\nu [w_\nu(t)R(\nu \rightarrow \mu) - w_\mu(t)R(\mu \rightarrow \nu)], \quad (7.1)$$

welche uns mit der Nebenbedingung

$$\sum_\mu w_\mu(t) = 1, \quad (7.2)$$

dass sich das System in einem dieser Zustände befinden muss, ergibt, wie sich die Gewichte über die Zeit verändern. Wenn wir uns für eine Messgröße Q interessieren, welche den Wert Q_μ im Zustand μ annimmt, erlauben uns die Gewichte einen Erwartungswert für Q zur Zeit t zu definieren:

$$\langle Q \rangle = \sum_{\mu} Q_{\mu} w_{\mu}(t). \quad (7.3)$$

Die Beziehung des Erwartungswerts $\langle Q \rangle$ zu Q lässt sich auf zwei unterschiedliche Weisen verstehen. In der Ensemble-Interpretation nach Gibbs betrachtet man ein Ensemble von unabhängigen Kopien unseres Systems, die alle unabhängig voneinander mit ihrem eigenen Wärmebad wechselwirken. Dann ist $\langle Q \rangle$ ein guter Schätzer für das Ergebnis, das wir bekämen, wenn wir zum Zeitpunkt t in jedem System eine instantane Messung von Q durchführten und den Mittelwert über die Ergebnisse bildeten.

Die alternative Sichtweise ist weniger streng, aber dafür näher an der experimentellen Situation. Wir betrachten nur ein einzelnes System, an dem wir eine nicht-instantane Messung durchführen. Dann lässt sich $\langle Q \rangle$ als der zeitlichen Mittelwert von Q verstehen, vorausgesetzt, dass das System während der Messung eine repräsentative Auswahl der Zustände in der Wahrscheinlichkeitsverteilung w_{μ} durchläuft. Dies sicherzustellen ist das größte Problem, denn häufig sind die Übergangsraten $R(\mu \rightarrow \nu)$ nur für sehr ähnliche Zustände nicht verschwindend klein: dies führt uns auf das *importance sampling*. Ein weiteres Problem dieser Interpretation ist, dass sich die Gewichte $w_{\mu}(t)$ während der Messung deutlich ändern können. Da dies aber in der Gleichgewichts-MC-Rechnung nicht auftritt, werden wir hierauf nicht näher eingehen.

7.1.1 Gleichgewichtszustand

Kehren wir noch einmal zur Mastergleichung (7.1) zurück. Angenommen, dass das System einen Gleichgewichtszustand erreicht, in dem sich die beiden Terme auf der rechten Seite gerade zu null ergänzen, dann ist

$$\frac{dw_{\mu}}{dt} = 0 \quad (7.4)$$

und die Gewichte bleiben konstant. Da es sich bei der Mastergleichung um eine Differentialgleichung erster Ordnung handelt und w_{μ} auf Werte zwischen null und eins beschränkt sind, müssen alle Systeme, die durch diese Gleichung beschrieben werden können, früher oder später ihr Gleichgewicht erreichen.

Der entscheidende Punkt ist, dass wir die Besetzungswahrscheinlichkeiten

$$b_{\mu} = \lim_{t \rightarrow \infty} w_{\mu}(t) \quad (7.5)$$

unseres Systems bereits kennen. Denn nach Gibbs entsprechen diese einer *Boltzmann-Verteilung*

$$b_\mu = \frac{1}{Z} e^{-\beta E_\mu} \quad (7.6a)$$

mit der Zustandssumme

$$Z = \sum_{\mu} e^{-\beta E_\mu}. \quad (7.6b)$$

Die zentrale Idee der MC-Rechnung ist, die physikalischen Prozesse, die der Mastergleichung (7.1) zugrunde liegen, zu simulieren, indem wir die Übergangsraten nutzen, um die Zustände auszuwählen, die unser Modellsystem durchläuft. Aus diesen Zuständen lassen sich dann direkt Erwartungswerte für die uns interessierenden Messgrößen bestimmen. Wir müssen die Übergangsraten also derart wählen, dass sie die zufälligen thermischen Fluktuationen durch die Wechselwirkung des Systems mit dem Wärmebad widerspiegeln, d. h. dass das Modellsystem unserer MC-Simulation die gleiche Wahrscheinlichkeitsverteilung $w_\mu(t)$ hervorbringt wie das reale System. Dies erreichen wir, indem wir die Übergangsraten $R(\mu \rightarrow \nu)$ so wählen, dass die Gleichgewichtslösung der zugehörigen Mastergleichung genau gleich der Boltzmannverteilung ist.

Der große Vorteil der MC-Rechnung liegt darin, dass wir nicht länger jeden möglichen Zustand berücksichtigen müssen, um eine physikalische Größe zu bestimmen, wie es bei einer direkten Berechnung aus (7.6b) nötig wäre. Diesen Vorteil bezahlt man natürlich mit dem Auftreten von statistischen Fehlern und Rauschen in den Messwerten. Da der analytische oder exakte Weg in den Anwendungsgebieten der MC-Simulationen üblicherweise nicht gangbar ist und sich die Fehler, wie wir sehen werden, kontrollieren lassen, ist man gerne bereit diesen Nachteil in Kauf zu nehmen.

7.2 Prinzipien der MC-Simulation

Wir haben gesehen, dass wir den Erwartungswert $\langle Q \rangle$ einer Messgröße Q berechnen können, indem wir den mit der Boltzmannwahrscheinlichkeit gewichteten Mittelwert über die Messwerte Q_μ in allen möglichen Zuständen μ des Systems bilden. Da das Modellsystem im allgemeinen zu viele mögliche Zustände besitzt, können wir nur über eine Untermenge summieren. Der MC-Algorithmus wählt deshalb M Zustände $\mu_1 \dots \mu_M$ mit einer Wahrscheinlichkeitsverteilung p_μ aus. Dann ist unser bestmöglicher Schätzer für Q

$$Q_M = \frac{\sum_{i=1}^M Q_{\mu_i} p_{\mu_i}^{-1} e^{-\beta E_{\mu_i}}}{\sum_{j=1}^M p_{\mu_j}^{-1} e^{-\beta E_{\mu_j}}} \xrightarrow{M \rightarrow \infty} \langle Q \rangle. \quad (7.7)$$

Die Wahl der p_μ hat einen entscheidenden Einfluss auf die Qualität unseres Schätzers. Nehmen wir an, wir wählen jeden Zustand mit derselben Wahrscheinlichkeit aus und betrachten ein System bei niedriger Temperatur. Da nicht genügend thermische Energie vorhanden ist, um das System in höhere Zustände anzuregen, werden die Summen in (7.7) durch sehr wenige Zustände dominiert. Dann ist aber die Wahrscheinlichkeit während einer MC-Simulation einen dieser Zustände zufällig auszuwählen verschwindend gering und Q_M liefert einen sehr unpräzisen Schätzwert für $\langle Q \rangle$. Wir können aber aus der Not eine Tugend machen, indem wir gerade die wichtigen Zustände mit einer großen Wahrscheinlichkeit auswählen. Die führt uns auf das Prinzip des

7.2.1 importance sampling

Im System selbst treten die Zustände gemäß der Boltzmannverteilung auf. Wir imitieren diesen Effekt in unserer Simulation, indem wir versuchen unsere Stichprobe so zu wählen, dass die einzelnen Zustände mit einer Wahrscheinlichkeit proportional zu ihrem Boltzmanngewicht $p_\mu = Z^{-1}e^{-\beta E_\mu}$ auftreten. Dann vereinfacht sich der Schätzer (7.7) zu

$$Q_M = \frac{1}{M} \sum_{i=1}^M Q_{\mu_i}. \quad (7.8)$$

Aber wie erzeugen wir diese Zustände? Es ist nicht sinnvoll zufällig Zustände zu erzeugen und diese mit p_μ zu akzeptieren, da dies auf dieselben Problemen führen würde. Die meisten MC-Algorithmen verwenden einen *Markov-Prozess*, um geeignete Zustände zu generieren.

7.2.2 Markov-Prozesse

Ein Markov-Prozess ist ein Mechanismus, der aus dem Zustand μ des Systems zufällig mit einer *Übergangswahrscheinlichkeit* $P(\mu \rightarrow \nu)$ einen neuen Zustand ν generiert. Außerdem muss er zwei weitere Bedingungen erfüllen:

- $P(\mu \rightarrow \nu)$ ist konstant in der Zeit
- $P(\mu \rightarrow \nu)$ hängt nur von den Zuständen μ und ν ab.

Der Markov-Prozess hat kein Gedächtnis, sondern erzeugt unabhängig von allen vorherigen Zuständen immer mit der gleichen Wahrscheinlichkeit aus μ den neuen Zustand ν . Es ist jedoch nicht nötig, dass $P(\mu \rightarrow \mu)$ gleich null ist; es existiert also eine endliche Wahrscheinlichkeit, dass das System im Zustand μ verweilt. Allerdings muss der Markov-Prozess einen Zustand erzeugen:

$$\sum_{\nu} P(\mu \rightarrow \nu) = 1 \quad (7.9)$$

In MC-Simulationen wird der Markov-Prozess wiederholt angewendet, um eine *Markov-Kette* von Zuständen zu generieren. Dieser wird dabei so gewählt, dass unabhängig vom Ausgangszustand schließlich immer eine Folge an Zuständen entsprechend ihrer Boltzmannverteilung produziert wird (*Equilibrierung*). Dies können wir erreichen, indem wir zusätzlich die Bedingungen der *Ergodizität* und des *detaillierten Gleichgewichts* erfüllen.

7.2.3 Ergodizität

In einer Boltzmannverteilung treten alle Zustände mit einer von null verschiedenen Wahrscheinlichkeit auf. Das heißt, dass es dem Markov-Prozess möglich sein muss, von jedem Zustand alle Zustände zu erreichen. Wir können trotzdem einzelne Übergangswahrscheinlichkeiten auf null setzen; es muss aber gewährleistet sein, dass mindestens ein Pfad nicht-verschwindender Übergangswahrscheinlichkeiten zwischen zwei beliebigen Zuständen existiert.

7.2.4 Detailliertes Gleichgewicht

Die Bedingung des detaillierten Gleichgewichts stellt sicher, dass nach einer endlichen Anzahl MC-Schritte eine Boltzmannverteilung erzeugt wird. Im Gleichgewicht muss die Rate, mit der das System aus und in einen beliebigen Zustand μ übergeht, gleich sein:

$$\sum_{\nu} p_{\mu} P(\mu \rightarrow \nu) = \sum_{\nu} p_{\nu} P(\nu \rightarrow \mu). \quad (7.10)$$

Dies entspricht einer zeitdiskreten Version der Mastergleichung (7.1) mit verschwindender Ableitung. Man kann jedoch leicht zeigen, dass diese Bedingung auch durch Grenzyklen erfüllt wird. Dies wird jedoch durch die strengere Bedingung des detaillierten Gleichgewichts verhindert:

$$p_{\mu} P(\mu \rightarrow \nu) = p_{\nu} P(\nu \rightarrow \mu). \quad (7.11)$$

Mit Gleichung (7.11) ist es also möglich mit unserem Markov-Prozess Zustände einer bestimmten Verteilung p_{μ} zu erzeugen. Wir können also einfach für p_{μ} die Boltzmannwahrscheinlichkeiten wählen:

$$\frac{P(\mu \rightarrow \nu)}{P(\nu \rightarrow \mu)} = \frac{p_{\nu}}{p_{\mu}} = e^{-\beta(E_{\nu} - E_{\mu})}. \quad (7.12)$$

Diese Gleichung, (7.9) und die Ergodizität sind die Bedingungen, die der Markov-Prozess erfüllen muss, damit die erzeugte Gleichgewichts- eine Boltzmannverteilung ist.

7.2.5 Akzeptanzwahrscheinlichkeit

Es erscheint zunächst schwierig einen geeigneten Markov-Prozess zu finden, der exakt die richtigen Übergangswahrscheinlichkeiten liefert. Wir können dieses Problem jedoch umgehen und jeden Algorithmus zur Erzeugung neuer Zustände verwenden, indem wir die Übergangswahrscheinlichkeit $P(\mu \rightarrow \nu)$ in eine Auswahlwahrscheinlichkeit $g(\mu \rightarrow \nu)$ für den neuen Zustand ν und eine Akzeptanzwahrscheinlichkeit $A(\mu \rightarrow \nu)$, mit der der neue Zustand angenommen wird, unterteilen:

$$P(\mu \rightarrow \nu) = g(\mu \rightarrow \nu) A(\mu \rightarrow \nu) \quad (7.13)$$

Dies gibt uns komplette Freiheit bei der Wahl von $g(\mu \rightarrow \nu)$, da (7.12) nur das Verhältnis

$$\frac{P(\mu \rightarrow \nu)}{P(\nu \rightarrow \mu)} = \frac{g(\mu \rightarrow \nu)A(\mu \rightarrow \nu)}{g(\nu \rightarrow \mu)A(\nu \rightarrow \mu)} \quad (7.14)$$

festlegt. Dadurch dass nicht mehr jeder neue Zustand akzeptiert wird, verringert sich natürlich die Effizienz des MC-Algorithmus. Da (7.14) aber auch nur $A(\mu \rightarrow \nu)/A(\nu \rightarrow \mu)$ fixiert, können wir beide Werte mit einem Faktor multiplizieren, und dies ausnutzen, um den größeren der beiden auf seinen Maximalwert von eins anzuheben. Trotzdem muss es immer unser primäres Ziel sein, möglichst viel der Abhängigkeit von $P(\mu \rightarrow \nu)$ von den Zuständen μ und ν in der Auswahlwahrscheinlichkeit $g(\mu \rightarrow \nu)$ auszudrücken und möglichst wenig in die Akzeptanzwahrscheinlichkeit einzubringen.

7.3 Algorithmus

Im Prinzip haben wir nun das notwendige Wissen, um einen MC-Algorithmus zu entwickeln. Bevor wir jedoch damit beginnen, ist es sinnvoll auf die Besonderheiten des simulierten Systems einzugehen. Um die Grenzflächendicke mit der Korrelationslänge vergleichen zu können, darf diese nicht zu klein sein. Die Korrelationslänge ξ zeigt ein universelles Skalenverhalten:

$$\xi \propto |t|^{-\nu} \propto \left| \frac{T - T_c}{T_c} \right|^{-\nu}, \quad (7.15)$$

wobei t die reduzierten Temperatur, T_c die kritischen Temperatur und ν der kritische Exponent ist. Das heißt, um unser System mit ausreichend großer Korrelationslänge in der Phase gebrochener Symmetrie untersuchen zu können, sind wir gezwungen, nahe unterhalb der kritischen Temperatur zu arbeiten. In dieser Region bilden sich jedoch große Cluster aus, die zu kritischen Fluktuationen in den Beobachtungsgrößen und zu großen statistischen Fehlern führen. Da es sich hierbei um eine inhärente

physikalische Eigenschaft des Systems handelt, ist es umso wichtiger, dass der Algorithmus hiervon weitgehend unbeeinflusst bleibt, das heißt, dass der Markov-Prozess möglichst unabhängige Zustände produziert.

7.3.1 Autokorrelationszeit

Die Autokorrelationszeit τ ist ein Maß dafür, wie lange es dauert, um das System von einem Zustand in einen anderen zu überführen, der sich signifikant vom ursprünglichen unterscheidet. Betrachten wir zum Beispiel die Magnetisierung m des Systems. Dann ist die Autokorrelation $\chi(t)$ durch

$$\begin{aligned}\chi(t) &= \int dt' [m(t') - \langle m \rangle] [m(t' + t) - \langle m \rangle] \\ &= \int dt' [m(t')m(t' + t) - \langle m \rangle^2]\end{aligned}\quad (7.16)$$

gegeben. Die typische Zeitskala, mit der die Autokorrelation exponentiell abfällt, definiert die Autokorrelationszeit τ :

$$\chi(t) \propto e^{-t/\tau}. \quad (7.17)$$

Man betrachtet Zustände in der Markov-Kette, die mindestens um 2τ auseinanderliegen, als statistisch unabhängig. Problematisch ist, dass die Autokorrelation für große Zeiten stark verrauscht ist und somit ein Exponentialfit zur Bestimmung der Autokorrelationszeit abhängig von der Obergrenze des Fits ist. Eine numerisch stabilere Alternative zur Bestimmung von τ ist, die *integrierte Autokorrelationszeit* zu berechnen:

$$\int_0^\infty \frac{\chi(t)}{\chi(0)} dt \approx \int_0^\infty e^{-t/\tau} dt = \tau. \quad (7.18)$$

Die Bedeutung der Autokorrelationszeit und ihr Einfluss auf die Fehlerrechnung wird in Kapitel 7.4 diskutiert.

Leider ist die Korrelationslänge nicht die einzige Größe, die am kritischen Punkt divergiert, sondern auch die Autokorrelationszeit gehorcht einem Potenzgesetz:

$$\tau \propto |t|^{-z\nu}. \quad (7.19a)$$

Der *dynamische Exponent* z ist keine universelle Größe, sondern wird allein durch den gewählten Algorithmus bestimmt. Zusammen mit Gleichung (7.15) folgt

$$\tau \propto \xi^z, \quad (7.19b)$$

bzw. da die Korrelationslänge am kritischen Punkt durch die endliche Ausdehnung des Gitters beschränkt ist:

$$\tau \propto L^z. \quad (7.19c)$$

Insbesondere für große Gitterdimensionen L ist also die Wahl eines passenden Algorithmus von entscheidender Bedeutung. Da wir später den logarithmischen Zusammenhang zwischen der Blockgröße und der Grenzfläche untersuchen wollen, sind wir gezwungen auch große Gitter zu simulieren.

7.3.2 Metropolis-Algorithmus

Der nach Nicolas Metropolis [MRR⁺53] benannte Algorithmus folgt genau dem im Kapitel 7.2 beschriebenen Weg. Wir wählen die Auswahlwahrscheinlichkeiten $g(\mu \rightarrow \nu)$ zur Erzeugung eines neuen Zustandes für alle möglichen Zustände ν gleich, indem wir zufällig das Feld an einer Gitterposition um einen Wert zwischen $-1,5$ und $+1,5$ variieren. Die Akzeptanzwahrscheinlichkeiten $A(\mu \rightarrow \nu)$ legen wir so fest, dass (7.14) die Bedingung für das detaillierte Gleichgewicht (7.12) erfüllt. Damit wird das Verhältnis der Akzeptanzraten ausschließlich durch die Energiedifferenz zwischen dem alten Zustand μ und dem neuen ν bestimmt.

$$\frac{P(\mu \rightarrow \nu)}{P(\nu \rightarrow \mu)} = \frac{g(\mu \rightarrow \nu)A(\mu \rightarrow \nu)}{g(\nu \rightarrow \mu)A(\nu \rightarrow \mu)} = \frac{A(\mu \rightarrow \nu)}{A(\nu \rightarrow \mu)} = e^{-\beta(E_\nu - E_\mu)} \quad (7.20)$$

Um die Effizienz zu maximieren, legen wir die größere der beiden Akzeptanzraten auf eins fest und passen die andere an. Betrachten wir den Fall, dass das System aus μ in einen Zustand ν höherer Energie übergeht: $E_\nu > E_\mu$. Dann ist $A(\nu \rightarrow \mu)$ die größere Akzeptanzrate und wir setzen sie auf 1. Damit Gleichung (7.20) auch weiterhin erfüllt ist, muss $A(\mu \rightarrow \nu)$ dann den Wert $e^{-\beta(E_\nu - E_\mu)}$ annehmen. Somit folgt für den Algorithmus:

$$A(\mu \rightarrow \nu) = \begin{cases} e^{-\beta(E_\nu - E_\mu)} & \text{falls } E_\nu - E_\mu > 0, \\ 1 & \text{sonst.} \end{cases} \quad (7.21)$$

Mit der Wirkung

$$S = \sum_x \left\{ -2\kappa \sum_\mu \phi_x \phi_{x+\hat{\mu}} + \phi_x^2 + \lambda (\phi_x^2 - 1)^2 \right\}, \quad (7.22)$$

wobei μ die Summe über die mit dem Einheitsvektor $\hat{\mu}$ gekennzeichneten nächsten Nachbarn ist, ergibt sich für die Energiedifferenz bei Änderung des Feldes am Ort x von ϕ_x auf ϕ'_x :

$$\Delta E = -2\kappa \sum_\mu (\phi'_x - \phi_x) \phi_{x+\hat{\mu}} + \phi_x'^2 - \phi_x^2 - 2\lambda (\phi_x'^2 - \phi_x^2) + \lambda (\phi_x'^4 - \phi_x^4) \quad (7.23)$$

Es ist leicht ersichtlich, dass man durch wiederholtes Anwenden des Algorithmus theoretisch alle Zustände erreichen kann, die Ergodizität ist also gewährleistet.

Aber wie verhält sich der Metropolis-Algorithmus in der Nähe der kritischen Temperatur? Dort bilden sich große Domänen gleich orientierter Spins aus. Da aber mit jedem Monte Carlo Schritt nur ein einzelner Gitterplatz geändert werden kann, ist zu erwarten, dass der Algorithmus die kritischen Fluktuation nicht gut imitieren kann. Denn dadurch, dass innerhalb einer Domäne die benachbarten Spins einen ähnlichen Wert haben, ist die Akzeptanzwahrscheinlichkeit für die neue Konfiguration klein und die Monte-Carlo-Zeit für jede Fluktuation wächst stark mit der Größe der Domänen an. In der Tat ist der dynamische Exponent zum Beispiel im 3D Ising-Modell mit $z = 2,02 \pm 0,02$ [NB99] sehr groß.

7.3.3 Wolff-Algorithmus im Ising-Modell

Dieses Problem umgeht der Wolff-Algorithmus. Betrachten wir zunächst das Ising-Modell:

$$H = -J \sum_{\langle ij \rangle} s_i s_j, \quad (7.24)$$

wobei die Summe nur über die nächsten Nachbarn läuft und J die Kopplungsstärke ist. Je weiter wir uns T_c nähern, desto größer werden die Domänen gleich ausgerichteter Spins, die kollektiv ihre Richtung ändern. Wenn wir dieses Verhalten effektiv in einen Monte Carlo Algorithmus übernehmen wollen, können wir nicht länger auf einen Single-spin-flip-Markov-Prozess wie den Metropolis-Algorithmus zurückgreifen, sondern müssen einen Weg finden, große Gebiete in einem Schritt zu ändern. Dies führt uns auf den Wolff-Algorithmus [Wol89].

Die zugrundeliegende Idee ist sehr einsichtig: Wir konstruieren einen *Cluster* aus gleich orientierten Spins, indem wir zufällig einen Spin des Gitters als Startpunkt wählen. Dann überprüfen wir sukzessive ob die benachbarten Spins das gleiche Vorzeichen haben und nehmen sie gegebenenfalls mit einer gewissen, von der Temperatur abhängigen Wahrscheinlichkeit P_{add} in den Cluster auf. Je näher wir der kritischen Temperatur sind, desto größer muss die Wahrscheinlichkeit für die Aufnahme in den Cluster sein, den wir anschließend mit der passenden Akzeptanzwahrscheinlichkeit umdrehen.

Abbildung 7.1 zeigt zwei Zustände μ und ν , die sich darin unterscheiden, dass in ν der durch die Linie gekennzeichnete Cluster gedreht wurde. Wir sehen, dass es auch außerhalb des gewählten Clusters m Spins gibt, die in die dieselbe Richtung zeigen, und deren Verbindung zum Cluster beim Umdrehen unterbrochen werden. Es gibt natürlich viele Wege, auf denen der Cluster konstruiert worden sein kann, aber wir wollen uns auf einen beliebigen festlegen, der ausgehend von einem bestimmten Spin die anderen in festgelegter Reihenfolge hinzugefügt hat. Dann unterscheidet

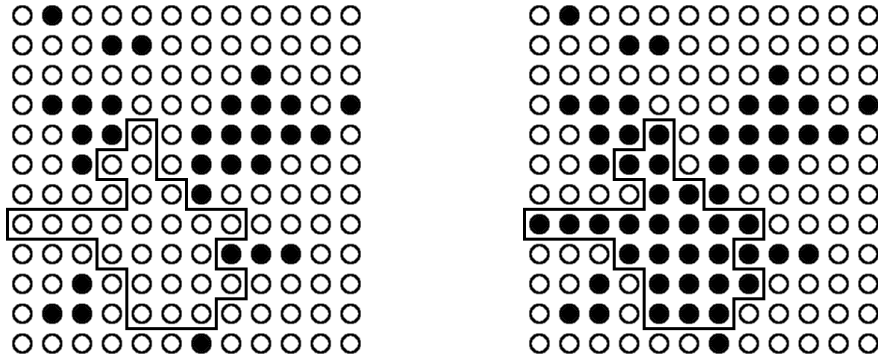


Abbildung 7.1: Wolff-Algorithmus am Beispiel eines 2D-Ising-Modells

sich der umgekehrte Weg, um von ν nach μ zurückzugelangen, nur durch die n unterbrochenen Verbindungen am Rand des Clusters. Somit ist die Wahrscheinlichkeit auf dem Vorwärtsweg keinen dieser Spins aufzunehmen $(1 - P_{\text{add}})^m$ und auf dem Rückwärtsweg $(1 - P_{\text{add}})^n$. Die Bedingung des detaillierten Gleichgewichts (7.12) liefert zusammen mit Gleichung (7.14):

$$\frac{g(\mu \rightarrow \nu)A(\mu \rightarrow \nu)}{g(\nu \rightarrow \mu)A(\nu \rightarrow \mu)} = (1 - P_{\text{add}})^{m-n} \frac{A(\mu \rightarrow \nu)}{A(\nu \rightarrow \mu)} = e^{-\beta(E_\nu - E_\mu)} \quad (7.25)$$

Jede der m Verbindung, die von μ nach ν unterbrochen wird, ändert die Energie um $+2J$ und jede der n neue Verbindung um $-2J$, sodass insgesamt

$$E_\nu - E_\mu = 2J(m - n) \quad (7.26)$$

ist. Eingesetzt in Gleichung (7.25) erhalten wir

$$\frac{A(\mu \rightarrow \nu)}{A(\nu \rightarrow \mu)} = \left[e^{2\beta J} (1 - P_{\text{add}}) \right]^{n-m}. \quad (7.27)$$

Nun können wir folgende erfreuliche Tatsache erkennen: Wenn wir

$$P_{\text{add}} = 1 - e^{-2\beta J} \quad (7.28)$$

wählen, dann ist die rechte Seite von (7.27) eins und wir können beide Akzeptanzwahrscheinlichkeiten maximal wählen und alle erzeugten Konfigurationen akzeptieren! Mit dieser Wahl arbeitet der Wolff-Algorithmus wie folgt:

1. Wähle zufällig einen Spin des Gitters aus.
2. Nehme nacheinander die benachbarten Spins, die in dieselbe Richtung zeigen, mit der Wahrscheinlichkeit P_{add} auf.

3. Wiederhole den zweiten Schritt für jeden neu hinzugefügten Spin. Benachbarte Spins, die bereits im Cluster sind, müssen nicht erneut betrachtet werden, wohl aber die, die beim vorherigen Mal abgewiesen wurden.
4. Wenn keine weiteren Spins hinzugefügt werden können, drehe den Cluster.

Der dynamische Exponent im 3D-Ising-Modell lässt sich durch den Wolff-Algorithmus auf $z = 0,33 \pm 0,01$ [NB99] reduzieren.

7.3.4 Cluster-Algorithmus für ϕ^4

Leider lässt sich der Wolff-Algorithmus in dieser Form nicht ohne weiteres in der ϕ^4 -Theorie verwenden, da eine einfache Unterscheidung in up- und down-Spins nicht möglich ist. Brower und Tamayo haben aber gezeigt, dass sich eine eingebettete Ising-Dynamik identifizieren und durch die Verwendung einer Kombination aus dem Swendsen-Wang-Cluster- und dem lokalen Heat-Bath-Algorithmus ein dynamischer Exponent kleiner als eins erreichen lässt [BT89]. Eine ausführliche Beschreibung und Herleitung des hier verwendeten Wolff- und Metropolis-Algorithmus findet sich auch in [Sch06].

Das ϕ^4 -Potenzial geht am kritischen Punkt von einem konvexen in ein Doppelmulden-Potenzial über, dessen beiden Minima durch die Kink-Lösung miteinander verbunden sind. Wir führen die diskreten Ising-Variablen s_x ein,

$$\phi_x = s_x |\phi_x|, \quad (7.29)$$

die die beiden Vakuas verbinden und aktualisieren sie durch einen angepassten Wolff-Algorithmus. Das heißt, indem wir für feste Werte von $|\phi_x|$ ein Ising-Modell in die ϕ^4 -Theorie einbetten, können wir mit einem nicht-lokalen Markov-Prozess die Dynamik wesentlich beschleunigen.

Da wir nur die Vorzeichen von ϕ betrachten, müssen wir den Wolff-Algorithmus nur leicht modifizieren. Wir können jedoch nicht mehr annehmen, dass die Wahrscheinlichkeit P_{add} zur Aufnahme in den Cluster für alle Gitterplätze gleich sind. Anstelle von Gleichung (7.25) erhalten wir:

$$\frac{g(\mu \rightarrow \nu)A(\mu \rightarrow \nu)}{g(\nu \rightarrow \mu)A(\nu \rightarrow \mu)} = \frac{\prod_{i=1}^m (1 - P_{\text{add}}^{(i)})}{\prod_{j=1}^n (1 - P_{\text{add}}^{(j)})} = e^{-(E_\nu - E_\mu)} \quad (7.30)$$

Für die Energiedifferenz sind die quadratischen Terme der Wirkung (7.22) nicht von Bedeutung. Alle m gebrochenen Verbindungen erhöhen die Energie jeweils um

$4\kappa\phi_x\phi_{x+\hat{\mu}}$ und jede der n erzeugten Verbindungen reduziert sie um denselben Betrag. $\phi_{x+\hat{\mu}}$ bezeichnet hierbei den benachbarten Spin außerhalb des Clusters.

$$\begin{aligned} \frac{\prod_{i=1}^m (1 - P_{\text{add}}^{(i)})}{\prod_{j=1}^n (1 - P_{\text{add}}^{(j)})} &= \exp(-\Delta E) = \exp\left(-\sum_{i=1}^m 4\kappa\phi_x^{(i)}\phi_{x+\hat{\mu}}^{(i)} + \sum_{j=1}^n 4\kappa\phi_x^{(j)}\phi_{x+\hat{\mu}}^{(j)}\right) \\ &= \frac{\prod_{i=1}^m e^{-4\kappa\phi_x^{(i)}\phi_{x+\hat{\mu}}^{(i)}}}{\prod_{j=1}^n e^{-4\kappa\phi_x^{(j)}\phi_{x+\hat{\mu}}^{(j)}}} \end{aligned} \quad (7.31)$$

zeigt uns, dass wir erneut durch die Wahl von

$$P_{\text{add}} = 1 - e^{-4\kappa\phi_x\phi_{x+\hat{\mu}}} \quad (7.32)$$

beide Akzeptanzwahrscheinlichkeit fest auf ihren Maximalwert von eins setzen dürfen. In den Simulationen wurden pro MC-Schritt 20 Wolff- mit 4 kompletten Metropolis-Updates kombiniert.

7.4 Fehlerrechnung: Γ -Methode

Die Γ -Methode von Ulli Wolff [Wol04] ist eine Möglichkeit, die Autokorrelationszeiten von Messgrößen, die nicht einfach als arithmetisches Mittel aus den MC-Daten berechnet werden, abzuschätzen. Die explizite Betrachtung der Autokorrelationsfunktionen erlaubt eine bessere Abschätzung des Fehlers gegenüber des häufig verwendeten Binning bzw. Jackknife-Binning, welche die Autokorrelationen nur implizit behandeln. Das folgende Kapitel gibt eine kurze Übersicht über die Arbeitsweise der Γ -Methode.

Unser Ziel ist einen Schätzwert zu finden für die Funktion F , eine abgeleitete Messgröße, die im allgemeinen nichtlinear von den primären Observablen A_α abhängt,

$$F \equiv f(A_1, A_2, \dots) \equiv f(A_\alpha). \quad (7.33)$$

zu finden und ihre Autokorrelationszeit zu bestimmen. Wir gehen davon aus, dass sich das System im Gleichgewicht befindet, und verwenden zur Abschätzung die MC-Werte der primären Observablen a_α^i . Für jede Observable gebe es $i = 1, 2, \dots, N$ Werte, die durch die Ausführung eines MC-Schrittes getrennt sind. In der Praxis ist es sinnvoll, nicht nur ein einzelnes System zu simulieren, sondern mehrere gleichzeitig. Diese triviale Parallelisierung liefert Replica, die im Folgenden mit dem Index $r = 1, 2, \dots, R$ bezeichnet werden. Die Korrelationsfunktion $\Gamma_{\alpha\beta}$

$$\left\langle (a_\alpha^{i,r} - A_\alpha)(a_\beta^{j,s} - A_\beta) \right\rangle = \delta_{rs}\Gamma_{\alpha\beta}(j - i) \quad (7.34)$$

korreliert die Abweichung des i -ten Schätzwertes von A_α mit der Abweichung der Variablen β nach $(j - i)$ MC-Schritten.

Da uns die exakten statistischen Mittelwerte A_α nicht zugänglich sind, definieren wir zunächst die Mittelwerte eines Replikums

$$\bar{a}_\alpha^r = \frac{1}{N_r} \sum_{i=1}^{N_r} a_\alpha^{i,r} \quad (7.35)$$

und über diese den natürlichen Schätzer der primären Observablen A_α

$$\bar{\bar{a}}_\alpha = \frac{1}{N} \sum_{r=1}^R N_r \bar{a}_\alpha^r, \quad (7.36)$$

wobei $N = \sum_{r=1}^R N_r$ die Gesamtzahl der Messwerte ist. Wir fordern, dass die Schätzwerte erwartungstreu sind und die Abweichungen vom exakten Wert

$$\bar{\delta}_\alpha^r = \bar{a}_\alpha^r - A_\alpha, \quad \bar{\bar{\delta}}_\alpha = \bar{\bar{a}}_\alpha - A_\alpha \quad (7.37)$$

verschwinden

$$\langle \bar{\delta}_\alpha^r \rangle = \langle \bar{\bar{\delta}}_\alpha \rangle = 0. \quad (7.38)$$

Nach dem zentralen Grenzwertsatz entsprechen die $\bar{a}_\alpha^{i,r}$ für genügend große N_r einer Normalverteilung, die durch die Kovarianz-Matrix

$$\langle \bar{\delta}_\alpha^r \bar{\delta}_\beta^s \rangle \stackrel{(7.34),(7.35),(7.37)}{=} \frac{1}{N_r^2} \sum_{i,j=1}^{N_r} \Gamma_{\alpha\beta}(j-i) \delta_{rs} = \frac{1}{N_r} C_{\alpha\beta} \delta_{rs} \times (1 + \mathcal{O}(\tau/N_r)) \quad (7.39)$$

gegeben ist, wobei

$$C_{\alpha\beta} = \sum_{t=-\infty}^{\infty} \Gamma_{\alpha\beta}(t) \quad (7.40)$$

nicht von der Länge der Simulation abhängt. Wir nehmen an, dass $\Gamma_{\alpha\beta}$ exponentiell mit der Autokorrelationszeit τ abfällt und die Simulationslänge $N_r \gg \tau$ ist, da ansonsten eine Fehlerabschätzung kaum möglich ist. Für die Kovarianzmatrix von $\bar{\bar{a}}_\alpha$ folgt

$$\langle \bar{\bar{\delta}}_\alpha \bar{\bar{\delta}}_\beta \rangle = \frac{1}{N} C_{\alpha\beta} \times (1 + \mathcal{O}(R_\tau/N)) \quad (7.41)$$

Unser Schätzwert $\bar{\bar{a}}_\alpha$ weicht also vom exakten Wert A_α um einen Fehler der Größenordnung $1/\sqrt{N}$ ab und das Ziel unserer Fehleranalyse ist es, $C_{\alpha\beta}$ möglichst genau abzuschätzen.

Als nächstes betrachten wir die Schätzer

$$\bar{\bar{F}} = f(\bar{\bar{a}}_\alpha) \quad (7.42)$$

und

$$\bar{F} = \frac{1}{N} \sum_{r=1}^R N_r f(\bar{a}_\alpha^r) \quad (7.43)$$

um die abgeleitete Messgröße F zu bestimmen. Wir nehmen an, dass die Schätzwerte der primären Observablen exakt genug sind, um eine Taylor-Entwicklung nach den Fluktuationen zu rechtfertigen:

$$\bar{\bar{F}} = F + \sum_{\alpha} f_{\alpha} \bar{\delta}_{\alpha} + \frac{1}{2} \sum_{\alpha\beta} f_{\alpha\beta} \bar{\delta}_{\alpha} \bar{\delta}_{\beta} + \dots \quad (7.44)$$

mit den Ableitungen

$$f_{\alpha} = \frac{\partial f}{\partial A_{\alpha}}, \quad f_{\alpha\beta} = \frac{\partial^2 f}{\partial A_{\alpha} \partial A_{\beta}}, \quad (7.45)$$

die an den *exakten* Werten A_1, A_2, \dots gebildet werden. Sofern f nichtlinear ist, ist der Schätzer von F nicht erwartungstreu. Betrachten wir die Abweichung $\langle \bar{\bar{F}} - F \rangle$, so verschwindet nach (7.38) die erste Summe und wir erhalten mit (7.41)

$$\langle \bar{\bar{F}} - F \rangle \simeq \frac{1}{2N} \sum_{\alpha\beta} f_{\alpha\beta} C_{\alpha\beta} \quad (7.46)$$

Der Fehler σ_F ist dann in der führenden Ordnung

$$\sigma_F^2 = \langle (\bar{\bar{F}} - F)^2 \rangle \simeq \frac{1}{N} C_F \quad (7.47)$$

mit

$$C_F = \sum_{\alpha\beta} f_{\alpha} f_{\beta} C_{\alpha\beta}. \quad (7.48)$$

Dies lässt sich noch durch die integrierte Autokorrelationszeit (7.18) ausdrücken

$$\sigma_F^2 = \frac{2\tau_{\text{int}, F}}{N} v_F \quad (7.49)$$

mit der naiven Varianz ohne Autokorrelationen

$$v_F = \sum_{\alpha\beta} f_{\alpha} f_{\beta} \Gamma_{\alpha\beta}(0) \quad (7.50)$$

und

$$\tau_{\text{int}, F} = \frac{1}{2v_F} \sum_{t=-\infty}^{\infty} \sum_{\alpha\beta} f_{\alpha} f_{\beta} \Gamma_{\alpha\beta}(t) \quad (7.51)$$

Gleichung (7.49) lässt sich so verstehen, dass nur $\frac{N}{2\tau_{\text{int}, F}}$ Messwerte tatsächlich im statistischen Sinne unabhängig sind und den Fehler reduzieren. Trotzdem ist es wichtig, mehr als nur diese Zustände zu messen, da ansonsten die Autokorrelationszeit selbst nur schlecht zu bestimmen ist.

Im Rahmen einer numerischen Simulation sind natürlich die exakten Werte A_{α} und f_{α} nicht zugänglich und wir definieren einen Schätzer für die Autokorrelationsfunktion:

$$\bar{\bar{\Gamma}}_{\alpha\beta} = \frac{1}{N - Rt} \sum_{r=1}^R \sum_{i=1}^{N_r-t} (a_{\alpha}^{i,r} - \bar{a}_{\alpha})(a_{\beta}^{i+t,r} - \bar{a}_{\beta}), \quad (7.52)$$

wobei natürlich zu beachten ist, dass $0 \leq t \ll N_r$ für alle r erfüllt ist. Um die Autokorrelation der gesuchten Größe F zu bestimmen, muss (7.52) projiziert werden

$$\bar{\bar{\Gamma}}_F(t) = \sum_{\alpha\beta} \bar{f}_{\alpha} \bar{f}_{\beta} \bar{\bar{\Gamma}}_{\alpha\beta}(t). \quad (7.53)$$

\bar{f}_{α} ist derselbe Gradient wie in (7.45), den wir jedoch nicht an den exakten Werten A_{α} bilden können, sondern aus den Daten abschätzen müssen. Hierzu führen wir zunächst eine natürliche Skala

$$h_{\alpha} = \sqrt{\frac{\bar{\bar{\Gamma}}_{\alpha\alpha}(0)}{N}} \quad (7.54)$$

ein, mit der wir dann den Gradienten der Funktion wie folgt definieren:

$$\bar{f}_{\alpha} \approx \frac{1}{2h_{\alpha}} [f(\bar{\alpha}_1, \bar{\alpha}_2, \dots, \bar{\alpha} + h_{\alpha}, \dots) - f(\bar{\alpha}_1, \bar{\alpha}_2, \dots, \bar{\alpha} - h_{\alpha}, \dots)]. \quad (7.55)$$

Bei der Berechnung der Grenzflächendicke werden aus vielen primären Observablen $m_c^B(z)$ (6.5) nur wenige abgeleitete Größen w_B^2 (6.12) berechnet. Es ist deshalb sinnvoll, nicht die gesamte Autokorrelationsmatrix $\bar{\bar{\Gamma}}_{\alpha\beta}(t)$ zu berechnen, sondern die gemessenen Daten direkt zu projizieren

$$a_{\alpha}^{i,r} \rightarrow a_f^{i,r} = \sum_{\alpha} \bar{f}_{\alpha} a_{\alpha}^{i,r} \quad (7.56)$$

und diese zur weiteren Berechnung nutzen. Desweiteren schätzen wir die Varianz und die Kovarianz-Matrix wie folgt ab:

$$\bar{v}_F = \bar{\bar{\Gamma}}_F(0) \quad (7.57)$$

und

$$\bar{C}_F(W) = \bar{\Gamma}_F(0) + 2 \sum_{t=1}^W \bar{\Gamma}_F(t). \quad (7.58)$$

Die Summe über $\bar{\Gamma}_F$ wird bei einem endlichen Wert W abgeschnitten, da die Funktion nach dem exponentiellen Abfall numerische Fluktuationen zeigt und nicht exakt auf null abfällt (siehe Abbildung 7.2).

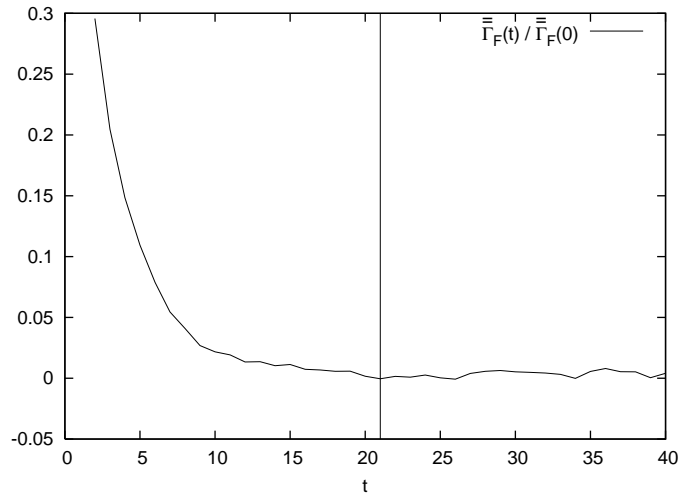


Abbildung 7.2: Exponentieller Abfall von $\frac{\bar{\Gamma}(t)}{\bar{\Gamma}(0)}$ bei der Berechnung der Grenzflächendicke über das Gradientenquadrat mit $L, B = 64$, $\lambda = 1.1$. Die senkrechte Linie zeigt das automatisch gewählte Fenster W .

In [Wol04] wird zudem ein Algorithmus vorgestellt, der es erlaubt das Fenster W in (7.58) automatisch zu bestimmen. Unter der Annahme, dass die Autokorrelationszeit $\tau \approx S\tau_{\text{int}}$ mit einem gewissen Faktor S ist, können wir den optimalen Wert für das Fenster bestimmen, indem wir zunächst die Funktion

$$g(W) = \exp[-W/\bar{\tau}(W)] - \bar{\tau}(W)/\sqrt{WN} \quad (7.59)$$

mit

$$\bar{\tau}(W) = S \left[\ln \left(\frac{2\bar{\tau}_{\text{int}, F}(W) + 1}{2\bar{\tau}_{\text{int}, F}(W) - 1} \right) \right]^{-1} \quad (7.60)$$

sukzessive für $W = 1, 2, \dots$ berechnen und das W , bei dem $g(W)$ sein Vorzeichen wechselt und negativ wird, als die obere Grenze der Summe festlegen. Falls $\bar{\tau}_{\text{int}, F} \leq \frac{1}{2}$ wird, setzen wir $\bar{\tau}(W)$ auf einen kleinen positiven Wert.

Trotzdem ist anschließend noch von Hand zu sicherzustellen, dass die geschätzte integrierte Autokorrelationszeit $\bar{\tau}_{\text{int},F}(W)$ als Funktion von W innerhalb ihres statistischen Fehlers

$$\left\langle (\bar{\tau}_{\text{int},F}(W) - \tau_{\text{int},F})^2 \right\rangle \approx \frac{4}{N} \left(W + \frac{1}{2} - \tau_{\text{int},F} \right) \tau_{\text{int},F}^2 \quad (7.61)$$

um den gewählten Wert für W ein Plateau zeigt (siehe Abbildung 7.3), welches sich durch eine geeignete Wahl des Parameters S beeinflussen lässt. [Wol04] empfiehlt $S = 1 \dots 2$, in der Auswertung der MC-Daten wurde mit $S = 1,7$ gearbeitet.

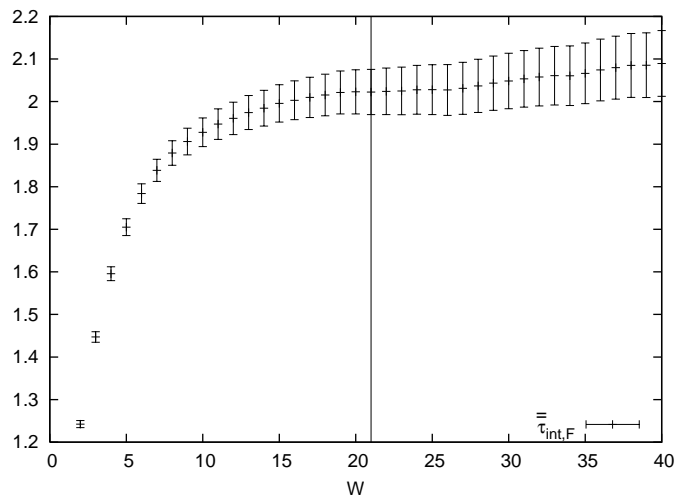


Abbildung 7.3: Integrierte Autokorrelationszeit $\bar{\tau}_{\text{int},F}$ als Funktion des Fensterparameters W bei der Berechnung von w^2 über das Gradientenquadrat für $L, B = 64$, $\lambda = 1.1$.

8 Ergebnisse

In diesem Kapitel werden die Ergebnisse aus den Rechnungen zur Bestimmung der Grenzflächendicke und der Einfluss des Parameters λ diskutiert. Bei allen verwendeten Werten für λ wird κ so gewählt, dass sich das System knapp unter der kritischen Temperatur befindet und die Korrelationslänge zwischen 3 und 5 Gitterabständen beträgt (siehe Tabelle 8.1).

Der größte Teil der Rechnungen wurde mit Condor [LLM88] auf dem Morfeus-GRID der Westfälischen Wilhelms-Universität Münster ausgeführt.

8.1 Korrelationslänge

Die ϕ^4 -Theorie gehört zur Universalitätsklasse des Ising-Modells und darüber hinaus vereinfacht sie sich im Grenzfall des Parameters $\lambda \rightarrow \infty$ bei festem κ zum Ising-Modell. Im anderen Grenzfall $\lambda = 0$ erhält man eine freie Feldtheorie. Bekanntermaßen existiert die ϕ^4 -Theorie in zwei Phasen, in der einen ist die Reflexionssymmetrie $\phi \rightarrow -\phi$ spontan gebrochen und in der anderen nicht. Die entsprechenden Bereiche in der κ - λ -Ebene werden durch die kritische Kurve $\kappa_c(\lambda)$ getrennt und werden qualitativ in Abbildung 8.1 gezeigt.

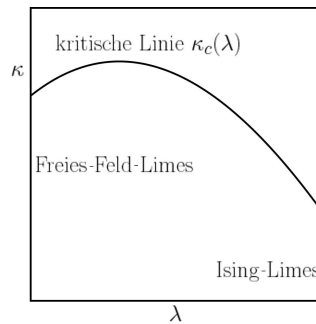


Abbildung 8.1: Qualitative Darstellung des Phasendiagramms der ϕ^4 -Theorie. Die Phase gebrochener Symmetrie ($\kappa > \kappa_c$) wird von der symmetrischen Phase ($\kappa < \kappa_c$) durch die kritische Linie getrennt, bei der die Korrelationslänge divergiert.

Leider wurden in der Literatur für die einkomponentige ϕ^4 -Theorie in drei Dimensionen nur für einige wenige Werte von λ die zugehörigen kritischen κ_c bestimmt (sie-

he z.B. [Has99]), sodass ein Vergleich der ϕ^4 -Theorie mit dem Ising-Modell anhand der kritischen Temperatur über weite Bereiche der Kopplungsstärke nicht möglich ist. Auch wenn wir die kritische Amplitude nicht kennen, wissen wir, dass in der Nähe des kritischen Punktes die kritische Temperatur dem Skalengesetz

$$\xi \propto |t|^{-\nu} \quad (8.1)$$

gehört. Da die in der Theorie getroffenen Aussagen auch nur die Grenzflächendicke mit der Korrelationslänge in Zusammenhang setzen, werden wir direkt auf diese zurückgreifen, um die ϕ^4 -Theorie mit dem Ising-Modell zu vergleichen.

Betrachten wir hierzu die verbundene 2-Punkt-Korrelationsfunktion $G_c^{(2)}(i,j)$ (siehe z.B. [MM94, CHP99]):

$$\begin{aligned} G_c^{(2)}(i,j) &\equiv \langle x_i x_j \rangle - \langle x_i \rangle \langle x_j \rangle \\ &= \langle (x_i - \langle x_i \rangle) \cdot (x_j - \langle x_j \rangle) \rangle. \end{aligned} \quad (8.2)$$

In Gittersimulationen ist es üblich, nicht die gesamte Korrelationsmatrix zu betrachten, sondern die Korrelationsfunktion über die sogenannten *Zeitscheiben*

$$S(z) = \frac{1}{XY} \sum_{\substack{0 \leq x < X \\ 0 \leq y < Y}} \phi(x,y,z) \quad (8.3)$$

des Gitters mit den Dimensionen $0 \leq x,y,z < X,Y,Z$ zu bilden. Die Bezeichnung Zeitscheibe ist Konvention aber in unserem Fall etwas irreführend, da wir ein dreidimensionales Gitter betrachten, dessen z -Achse nicht die Zeit ist.

Die Korrelationsfunktion der Zeitscheiben lautet

$$G(\tau) = \frac{1}{Z} \sum_z \{ \langle S(z) S(z + \tau) \rangle - \langle S(z) \rangle \langle S(z + \tau) \rangle \}, \quad (8.4)$$

wobei zugunsten einer besseren Statistik über z gemittelt wurde. Die exponentielle Korrelationslänge ξ ist dann die typische Längenskala, mit der die Korrelationsfunktion abfällt:

$$G(\tau) = c_1 + c_2 e^{-\tau/\xi}. \quad (8.5)$$

c_2 ist eine Konstante und c_1 ein Gitterartefakt, das im Limes $z \rightarrow \infty$ verschwindet.

Leider sind diese Definitionen nicht geeignet, um die Korrelationslänge der verwendeten Gitter mit antiperiodischen Randbedingungen zu bestimmen. Bei genauer Betrachtung zeigt sich, dass aufgrund der zufälligen Position der Grenzfläche $\langle S(z) \rangle$ und $\langle S(z + \tau) \rangle$ um null fluktuieren und somit die verbundene Korrelationsfunktion im antiperiodischen Gitter mathematisch identisch mit der unverbundenen bei periodischen Randbedingungen ist. Eine Möglichkeit wäre, die Grenzflächenposition zu fixieren, dann entspräche die Zeitscheibe der ohnehin bestimmten maximalen

Blockgröße bei der Untersuchung der Grenzflächendicke. Allerdings wird die Korrelationsfunktion von Gitter- und Randeffekten stark beeinträchtigt, sodass die Korrelationslänge deutlich überschätzt wird. Aus diesem Grund habe ich die Korrelationsfunktion in einer unabhängigen Simulation mit periodischen Randbedingungen berechnet. Mithilfe von Gnuplot lässt sich anschließend durch einen Fit der Art

$$G(\tau) = c_1 + c_2 \left(e^{-\tau/\xi} - e^{-(Z-\tau)/\xi} \right) \quad (8.6)$$

die Korrelationslänge präzise abschätzen, wobei der zweite Term der Periodizität des Gitters Rechnung trägt (siehe Abbildung 8.2).

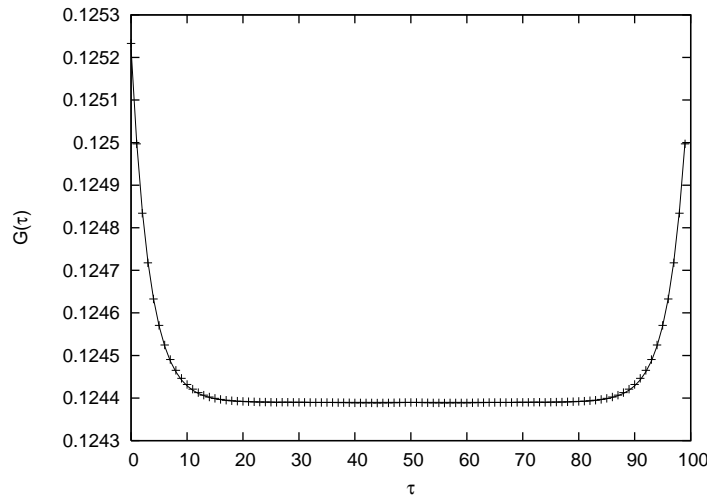


Abbildung 8.2: Korrelationsfunktion $G(\tau)$ für $\kappa = 0,1899$ und $\lambda = 1,1$.

Der Fit mit Gnuplot liefert

$$G(\tau) = 0,12439 + 0,000831(2) \left(e^{-\tau/3,26(1)} + e^{-(100-\tau)/3,26(1)} \right)$$

Gnuplot neigt beim Fit der Exponentialfunktion zu einer etwas optimistischen Einschätzung des Fehlers. Wir sind aber nicht darauf angewiesen, die Korrelationslänge sehr präzise zu bestimmen. Um die Ergebnisse mit der Gitterrechnung mit der Kontinuumstheorie vergleichen zu können, müssen wir nur sicher stellen, dass die Korrelationslänge mehrere Gitterabstände beträgt. Der Einfluss des Fehlers der Korrelationslänge auf den Gesamtfehler der Grenzflächendicke ist gering; aus diesem Grund berücksichtigen wir den doppelten von Gnuplot bestimmten Fehler. Die Tabelle 8.1 zeigt die Korrelationslängen der in den Simulationen verwendeten Parametern. Im folgenden beziehen wir uns mit $\lambda = 1,1$ immer auf Simulationen mit $\kappa = 0,189900$.

λ	κ	ξ
0,0001	0,168000	3,23(2)
0,01	0,171000	4,47(1)
0,1	0,188130	3,50(1)
0,4	0,200278	4,01(2)
1,1	0,189900	3,26(2)
1,1	0,189000	4,41(2)
10	0,120509	4,70(4)
30	0,114498	4,68(4)
50	0,113412	4,71(4)
125	0,188130	4,34(2)
∞	0,111947	4,44(2)

Tabelle 8.1: Korrelationslängen für verschiedene Simulationsparameter λ und κ der ϕ^4 -Theorie und dem Ising-Modell $\lambda = \infty$

8.2 Vom Ising-Modell zur ϕ^4 -Theorie

Die einkomponentige ϕ^4 -Theorie in der Gitterformulierung (6.17) hat zwei interessante Grenzwerte: Für $\lambda = 0$ erhalten wir das Gauß-Modell auf dem Gitter und im Limes $\lambda = \infty$ finden wir das Ising-Modell wieder. Unser Ziel ist es, die Grenzfläche in einem Parameterbereich zu untersuchen, in dem das System noch weit genug von der freien Theorie entfernt ist, um eine Grenzfläche auszubilden, und λ trotzdem klein genug ist, um ein zum Ising-Modell verschiedenes Verhalten zu ermöglichen.

Abbildung 8.3 zeigt die relative Häufigkeit N_ϕ mit der der Betrag der Feldvariablen ϕ für verschiedene Werte von λ auftritt. Die Kurven sind so normiert, dass sie ihr Maximum bei eins haben. Da das Ising-Modell nur die Zustände ± 1 kennt, würde es in dieser Darstellung als Delta-Funktion bei $|\phi| = 1$ auftauchen. Wir können sehen, dass sich für $\lambda = 125$ eine scharf lokalisierte Verteilung um den Ising-Wert ausbildet. Auch für $\lambda = 10$ treten die Werte um 1 am häufigsten auf, es lässt sich aber bereits eine Verschiebung zugunsten kleinerer Werte und eine deutliche Verbreiterung der Kurve erkennen. Die Abweichungen zum Ising-Fall sind ziemlich gering und wir werden diese Parameter deshalb nutzen, um die Simulation mit den Ising-Ergebnissen zu testen.

Für $\lambda = 1,1$, $\lambda = 0,4$ und $\lambda = 0,1$ hat sich das Verhalten geändert und wir befinden uns in einem qualitativ neuen Bereich. Das Maximum der Verteilung hat sich zu kleinen Werten verschoben und ist deutlich weniger stark ausgeprägt. Artefakte, wie sie durch die Diskretheit des Ising-Modells entstehen, sind auszuschließen und wir erwarten, dass die Simulation eine intrinsische Grenzflächendicke zeigt.

Für noch kleinere λ deutet der Gauß-artige Verlauf der Verteilung an, dass wir

uns dem freien Feld zu weit genähert haben. Die Auswertung der Grenzflächendicke wird in diesem Bereich kaum zu sinnvollen Ergebnissen führen.

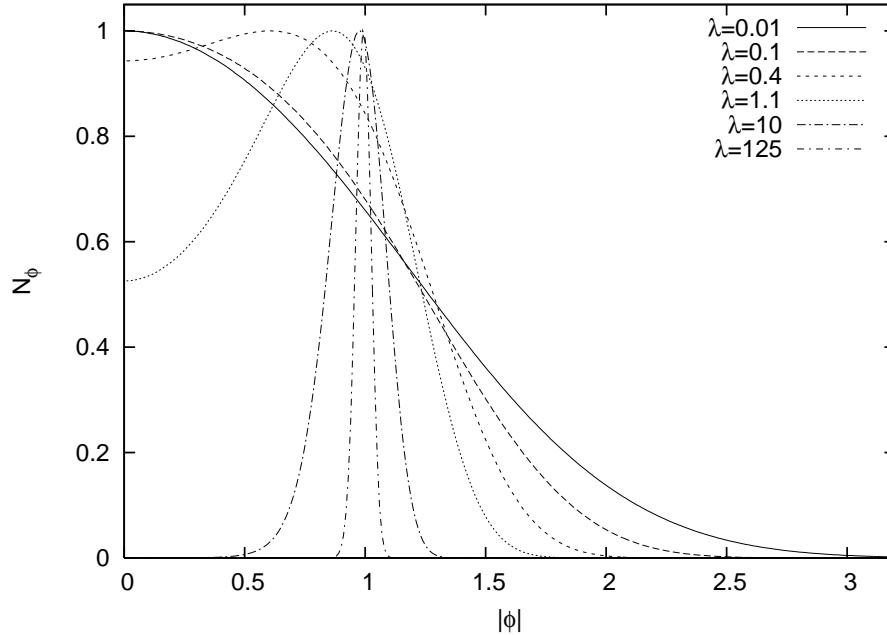


Abbildung 8.3: Normierte relative Häufigkeit der Spinvariablen

8.3 Grenzflächendicke

Die Theorie sagt für die in der MC-Simulation berechneten Grenzflächendicken (5.9) einen konstanten Wert für kleine Blockgrößen und einen linearen Anstieg mit $\log_2 B$ voraus:

$$w^2 = c_{\text{intr}} \xi^2 + A_{\text{KW}} \log_2 \frac{L}{B_{\text{KW}}} \quad (8.7)$$

bzw. in der universellen Formulierung (5.10)

$$\hat{w}^2 = \hat{w}_{\text{intr}}^2 + \hat{A}_{\text{KW}} \log_2 \frac{\hat{L}}{\hat{B}_{\text{KW}}}. \quad (8.8)$$

Die intrinsische Dicke beträgt

$$\hat{w}_{\text{intr}}^2 = \begin{cases} \frac{\pi^2 - 6}{12} \approx 0,322 & \text{für } p \propto \phi'_G{}^2 \\ \frac{\pi^2}{12} \approx 0,822 & \text{für } p \propto \phi'_G. \end{cases} \quad (8.9)$$

Da wir die Simulationen nicht bei exakt denselben Korrelationslängen ausführen können, werden wir im Folgenden immer die temperaturunabhängige Formulierung verwenden und das Dach weglassen.

Die Blockgröße B übernimmt die Rolle der Systemgröße L (siehe (5.11)), da alle Fluktuationen $\lambda > B$ abgeschnitten werden. Allerdings müssen wir beachten, dass die Randbedingungen für $B < L$ und $B = L$ unterschiedlich sind. Im ersten Fall sind diese unbekannt und werden durch die aktuelle Systemkonfiguration vorgegeben, im zweiten Fall liegen immer periodische Randbedingungen vor.

8.3.1 Vergleich mit dem Ising-Modell

Bei der Simulation des Ising-Modells kann keine intrinsische Grenzflächendicke beobachtet werden. Die Dicke bleibt für kleine Blockgrößen konstant, sie ist aber erheblich kleiner als der theoretische Mean-Field-Wert (Abbildung 8.4). Betrachtet man den Profilverlauf für diese Blockgrößen (Abbildung 8.5) erkennt man den Grund: Das Randschiebverfahren bestimmt die Grenzfläche so, dass sie immer zwischen zwei Spins mit entgegengesetzten Vorzeichen liegt. Für $B = 1$ bedeutet dies, dass die Grenzfläche auch im MC-gemitteltem Profil immer von -1 nach $+1$ springt. Mit steigender Blockgröße sind die Spins nicht mehr diskret und der Effekt nimmt ab.

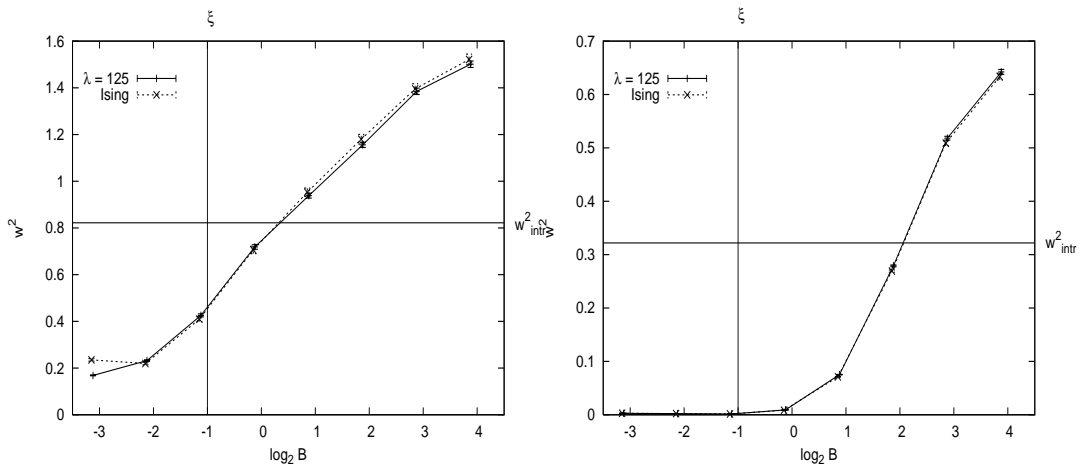


Abbildung 8.4: Dicken w^2 nach der Definition über $p \propto c'$ (links) und $p \propto c'^2$ (rechts) für das Ising-Modell und $\lambda = 125$.

Es ist zu erwarten, dass dieses Problem auch für große λ -Werte in den ϕ^4 -Simulationen auftaucht und wir werden dies nutzen, um zu entscheiden, in welchem Parameterbereich die ϕ^4 -Theorie sich wie ein Ising-Modell verhält. Der Profilverlauf für $\lambda = 125$ (Abbildung 8.5) unterscheidet sich kaum vom Ising-Modell und entspre-

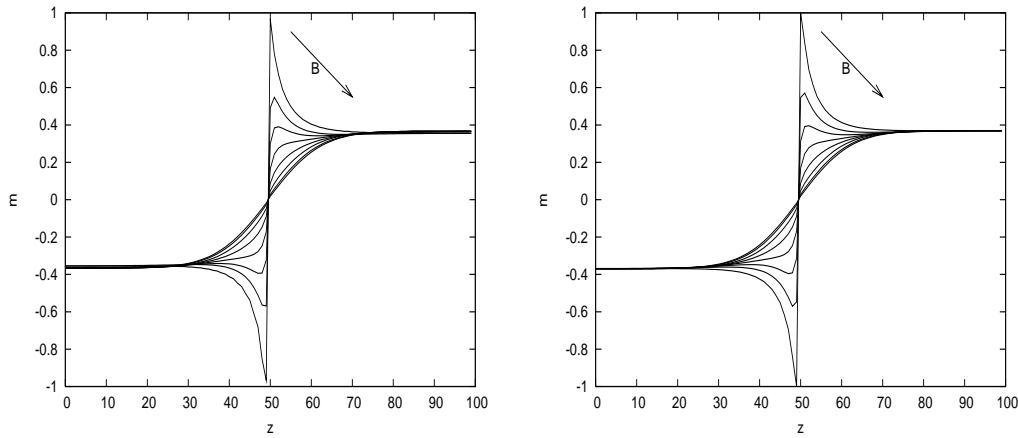


Abbildung 8.5: Grenzflächenprofile m_B für das Ising-Modell (links) und $\lambda = 125$ (rechts) mit den Blockgrößen $B = 2^0, \dots, 2^7$.

chend ist auch das Verhalten der Grenzflächendicke in Abhängigkeit der Blockgröße innerhalb ihrer Fehlerbalken identisch (Abbildung 8.4). Lediglich für $B = 1$, wo der Unterschied zum diskreten Modell am größten ist, weicht $\lambda = 125$ für die Definition der Grenzflächendicke über den Gradienten signifikant vom Ising-Wert ab.

Abbildungen 8.6 und 8.7 zeigen die Grenzflächendicke für $\lambda = 10, 30, 50$ und 125 . Der Verlauf aller Kurven ist gleich: Sie zeigen zunächst eine konstante, aber nicht intrinsische Dicke, die sich aus dem unphysikalischen Profilverlauf erklärt, und steigen bereits für Blockgrößen in der Größenordnung der Korrelationslänge an. Eine intrinsische Dicke lässt sich nicht beobachten, allerdings können wir die Blockgröße, bei der der theoretische Wert erreicht wird, zur Abschätzung des intrinsischen Cutoffs verwenden:

$$B_{\text{intr}} \sim \begin{cases} 2^{3/2}\xi \approx 2,83\xi & \text{für } p \propto c' \\ 2^3\xi = 8\xi & \text{für } p \propto c'^2 \end{cases} \quad (8.10)$$

Ab Blockgrößen von mehreren Korrelationslängen steigen die Grenzflächendicken linear mit $\log_2 B$ an, wie es die Kapillarwellen-Theorie vorhersagt. Das Abknicken für das maximale $B = L$ wird durch die unterschiedlichen Randbedingungen erzeugt; dies zeigt sich besonders beim Vergleich der Simulationen mit $L = 64$ und $L = 128$.

8.3.2 Vergrößerung des Parameterbereichs

Entfernen wir uns nun weiter vom Ising-Limes und untersuchen die Grenzflächendicke für die interessanten λ -Werte zwischen $0,1$ und $1,1$. Zusätzlich betrachten wir noch das Verhalten für $\lambda = 0,0001$ ($L = 64$), $\lambda = 0,01$ und $\lambda = 10$, um die Unterschiede zum freien Feld und Ising-Modell zu beleuchten.

Die Ergebnisse in den Abbildungen 8.8, 8.9, 8.10 und 8.11 überraschen. Es zeigt sich, dass das qualitative Verhalten der Grenzflächendicke mit der Blockgröße weitgehend unbeeinflusst von der Wahl des Parameters λ bleibt.

- Die Kurven $\lambda = 1,1$ und $\lambda = 0,4$ steigen über einen größeren Bereich linear mit $\log_2 B$ an und erreichen den theoretischen Wert w_{intr}^2 bereits früher als für $\lambda = 10$. Der intrinsische Cutoff reduziert sich für $p \propto c'$ auf $B_{\text{intr}} \approx 2\xi$. Insgesamt sind die Abweichungen vom Ising-Fall unerwartet gering und wir können kein intrinsisches Regime beobachten: Die Grenzflächendicken sind für kleine Blockgrößen immer noch deutlich kleiner als die theoretische Vorhersage und zeigen bei der Definition über den Gradienten auch keinen konstanten Bereich.
- Verringern wir λ auf 0,1, beobachten wir einen sofortigen linearen Anstieg von w^2 mit $\log_2 B$. Dieser flacht aber bereits für $B \approx \xi$ deutlich ab und die maximalen Dicken bleiben kleiner als die bisherigen. Der Knick deutet darauf hin, dass die untere Grenze des geeigneten Parameterbereichs für λ erreicht wurde.
- Für $\lambda = 0,01$ zeigt sich ein grundsätzlich verschiedener Verlauf von w^2 . Die Grenzfläche weist für kleine Blockgrößen einen deutlich größeren Wert auf, die Kurve knickt aber bereits bei der halben Korrelationslänge so stark ab, dass ein linearer Anstieg nicht mehr beobachtet werden kann. Für $\lambda = 10^{-4}$ sind die Grenzflächendicken weitgehend unabhängig von der Blockgröße. Das System bildet keine Grenzfläche mehr aus und verhält sich wie ein freies Feld.

Die Simulationsergebnisse widersprechen auch weiterhin den Vorhersagen der Theorie, und die Vermutung, dass Isingartefakte das Entstehen einer intrinsischen Grenzflächendicke verhindern, hat sich als falsch herausgestellt. Um die Effekte, die für die Abweichungen verantwortlich sind, weiter zurückzuverfolgen, betrachten wir als nächstes die in der Simulation erzeugten Profile.

8.3.3 Magnetisierungsprofile

Abbildung 8.12 zeigt die gemittelten Magnetisierungsprofile $m^B(z) = \langle m_c^B(z) \rangle$ (siehe (6.6)). Das Profil $\lambda = 10$ verhält sich erwartungsgemäß ähnlich zum Isingprofil (Abbildung 8.5), allerdings zeigen auch die Profile für kleine λ für kleine Blockgrößen den unphysikalischen Peak. Dieser ist zwar deutlich kleiner, doch es verwundert, dass er auch bei der Simulation mit kontinuierlichen Spins auftritt. In $m^8(z)$ ist er nur noch sehr schwach ausgeprägt und die Profile $B > 8$ zeigen den theoretisch vorhergesagten tanh-Kink. Dies deckt sich auch mit der Beobachtung, dass die Grenzflächendicke erst für diese Blockgrößen den Wert der intrinsischen Dicke überschreiten.

Abbildung 8.13 zeigt die lokalen Grenzflächenprofile $m_c^B(z)$ einer einzelnen Konfiguration. Aufgrund der viel geringeren Statistik unterliegen die Profile stärkeren Fluktuationen, aber trotzdem lässt sich auch hier unzweifelhaft das gleiche Problem erkennen.

Es zeigt sich, dass die Ursache grundlegender Natur ist. Betrachten wir die lokalen Profile $m_i^B(z)$ eines einzelnen Blocks bevor diese gemittelt werden (siehe Abbildungen 8.14 und 8.15), zeigt sich wie die Abweichungen von den theoretischen Vorhersagen entstehen.

In den kleinen Blockgrößen schwankt die Magnetisierung mit einer Amplitude, die größer als eins ist. Damit sind die Fluktuationen deutlich größer als das Kink-Profil, welches etwa zwischen $-0,3$ und $+0,3$ verläuft, und überlagern dieses vollständig. Im Mittel heben sich die Fluktuationen wieder auf, sie verhindern aber, dass das Randschiebeverfahren die Grenzflächenposition korrekt bestimmen kann. Stattdessen wird das Profil immer gerade so geschoben, dass in der Mitte des System ein großer Sprung in der Magnetisierung auftritt. Dies verhindert, dass die Fluktuationen sich nahe der Grenzflächenposition kompensieren und die erzeugten MC-Konfigurationen für das Profil korrekte Ergebnisse liefern können. Für die Blockgröße $B = 4$ sind die Fluktuationen noch so groß wie das Profil selbst und erst die Block-gemittelten Magnetisierungsprofile $m_i^8(z)$ zeigen einen genügend glatten Verlauf, um die Grenzflächenposition sicher bestimmen zu können.

In diesen Graphen lässt sich auch gut der Einfluss des λ -Parameters beobachten. Für $\lambda = 10$ und $B = 1$ springt das Profil zwischen Werten, die nahe bei ± 1 liegen. Für kleinere λ sind die Fluktuationen deutlich zufälliger und die Profile zeigen besser den tanh-Kink.

Die $m_i^1(z)$ werden direkt durch das Metropolis-Update des MC-Algorithmus um Werte zwischen $-1,5$ und $+1,5$ verändert. Um sicherzustellen, dass es sich bei den Schwankungen der Magnetisierung tatsächlich um physikalische Fluktuationen und nicht um Artefakte der MC-Simulation handelt, reduzieren wir die Amplitude, mit der der Metropolis-Algorithmus einen Spin verändern kann, auf $0,1$. Abbildung 8.16 zeigt, dass die $m_i^1(z)$ unabhängig von den Einstellungen sind: Die Größe der Fluktuationen hat sich nicht geändert.

8.3.4 Fixierung der Grenzfläche

Bisher konnten wir in den Simulationen die intrinsische Grenzflächendicke nicht nachweisen, da die genauen Grenzflächenpositionen für kleine Blockgrößen nicht zuverlässig bestimmt werden konnten.

Wir haben die Abweichungen von den theoretischen Vorhersagen genutzt, um den intrinsischen Bereich abzuschätzen, aber die intrinsische Dicke selbst blieb bisher verborgen. Indem wir das Wandern der Grenzfläche mit der zusätzlichen Zwangs-

bedingung

$$\phi\left(\frac{Z}{2}\right) = 0 \quad (8.11)$$

unterbinden und die Grenzfläche in der Mitte des Systems fixieren, können wir das intrinsische Profil betrachten. Abbildung 8.17 zeigt die Magnetisierungsprofile für $\lambda = 1.1$ mit der Bedingung (8.11) in einem System der Größe $L = 64$. Wir erkennen sofort, dass auch für $B = 1$ bereits das Konfigurationsmittel den tanh-Kink zeigt. Da es zu keiner Verbreiterung der Grenzflächendicke durch die Kapillarwellen kommen kann, sind die Ergebnisse im MC-Mittel für alle Blockgrößen gleich.

Die Auswertung der Profile ergibt:

w^2	$\lambda = 0,1$	$\lambda = 0,4$	$\lambda = 1,1$	$\lambda = 10$	theor.
$p \propto c'$	$1,01 \pm 0,04$	$0,87 \pm 0,02$	$0,86 \pm 0,02$	$0,722 \pm 0,01$	0,822
$p \propto c'^2$	$0,271 \pm 0,002$	$0,220 \pm 0,002$	$0,199 \pm 0,002$	$0,149 \pm 0,001$	0,322

- Die Gradient-Grenzflächendicken für $\lambda = 0,4$ und $\lambda = 1,1$ sind innerhalb der Fehler gleich und liegen nur leicht über der theoretischen Vorhersage. Da bei der Berechnung die höheren Ordnungen der Fluktuationen vernachlässigt wurden, sind die numerischen Ergebnisse für die intrinsische Grenzflächendicke konsistent mit der Theorie.

Für $\lambda = 10$ wird die Dicke unterschätzt, was auf die Ähnlichkeit zum Ising-Modell zurückzuführen ist. Es treten also tatsächlich Abweichungen durch Ising-Artefakte auf, diese sind aber vergleichsweise klein. Der Parameter $\lambda = 0,1$ an der Grenze zum freien Feld liefert einen deutlich größeren Wert.

- Die Gradient-Quadrat-Dicken zeigen untereinander das gleiche Verhalten: $\lambda = 0,4$ und $\lambda = 1,1$ liefern dieselben Werte, $\lambda = 0,1$ weicht nach oben und $\lambda = 10$ nach unten ab. Insgesamt liegen aber alle Ergebnisse unter der Vorhersage. Dies ist vermutlich darauf zurückzuführen, dass die Berechnung der Grenzflächendicke über die Definition des Gradientenquadrats numerisch anfälliger ist.

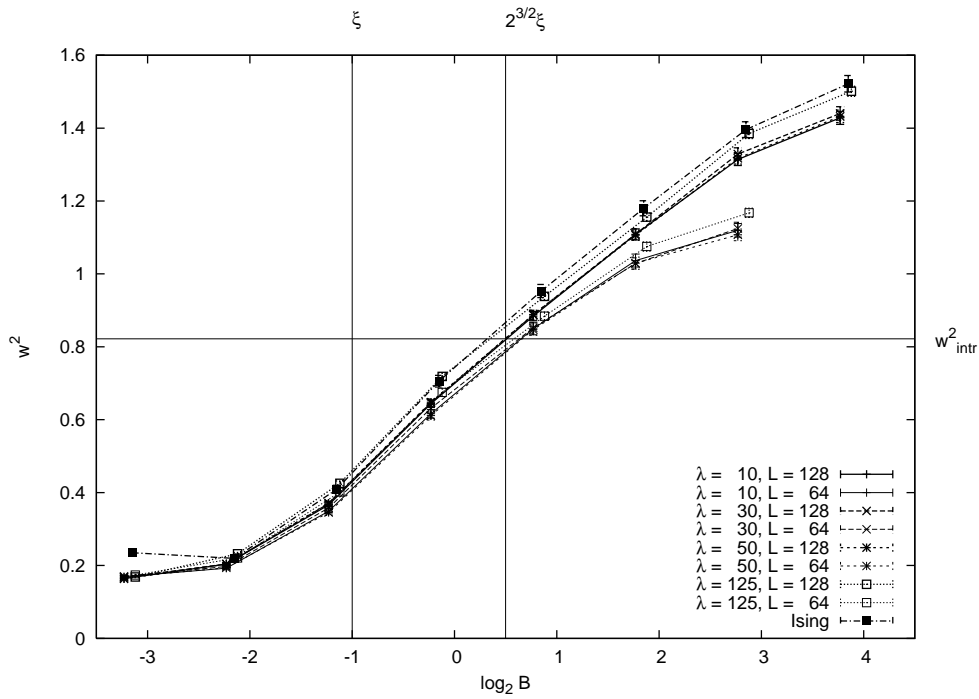


Abbildung 8.6: Gradient-Dicken der Grenzfläche für $\lambda = 10, 30, 50$ und 125 .

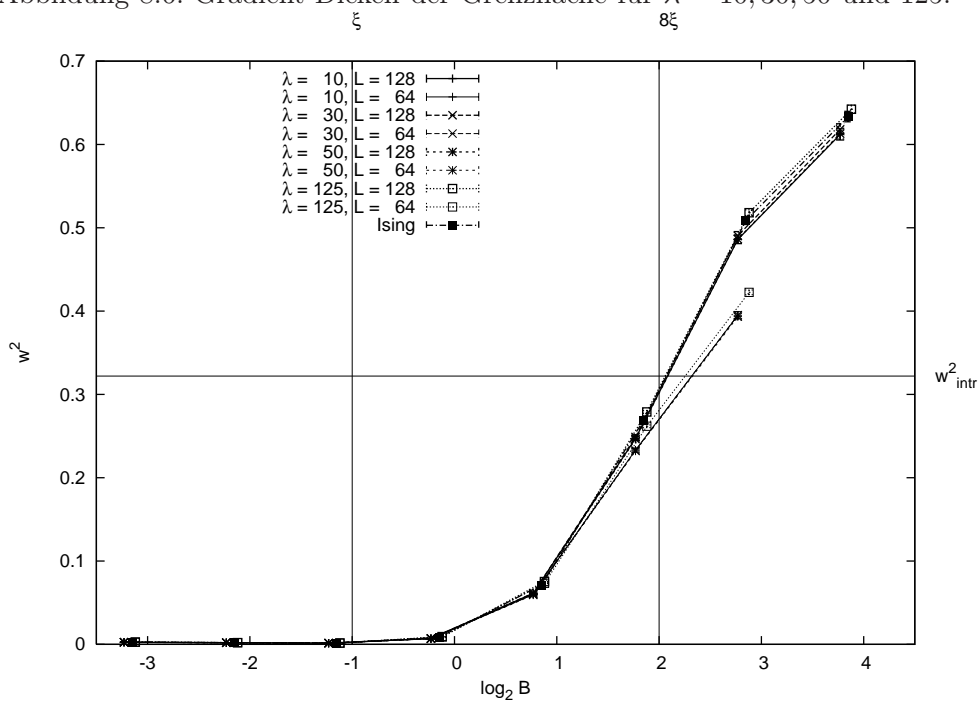


Abbildung 8.7: Gradient-Quadrat-Dicken der Grenzfläche für die ϕ^4 -Theorie mit $\lambda = 10, 30, 50$ und 125 .

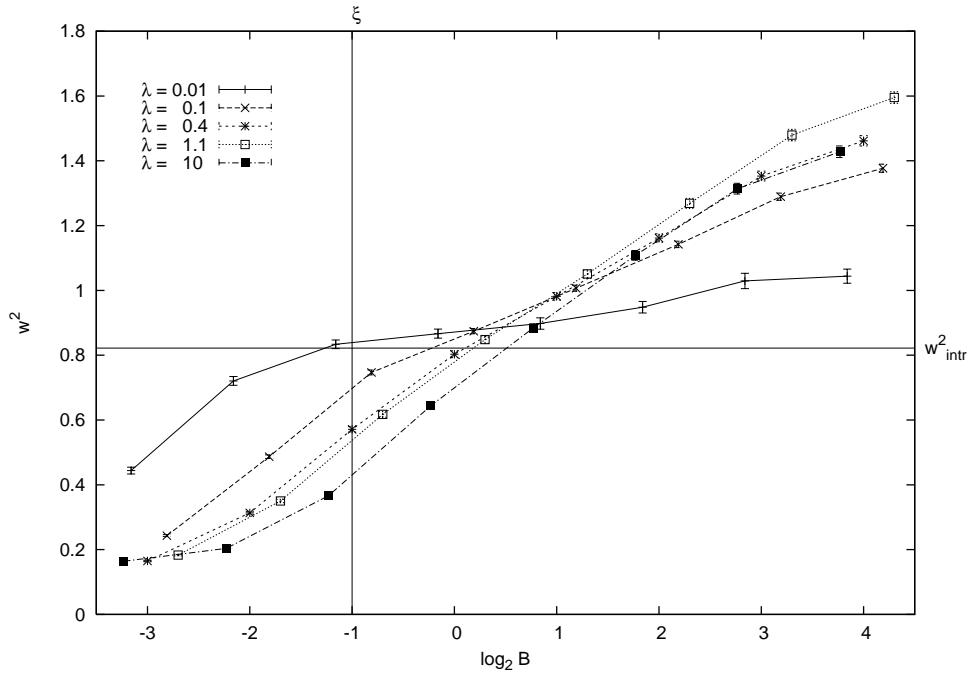


Abbildung 8.8: Gradient-Dicken für $0.01 \leq \lambda \leq 10$ und der Gittergröße $L = 128$.

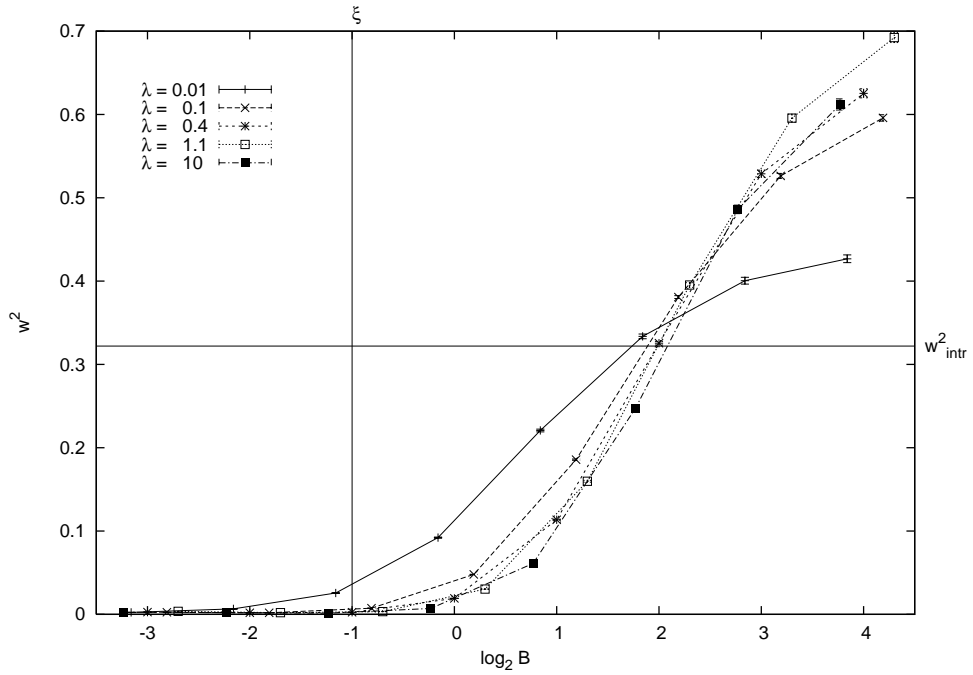


Abbildung 8.9: Gradient-Quadrat-Dicken für $0.01 \leq \lambda \leq 10$ und der Gittergröße $L = 128$.

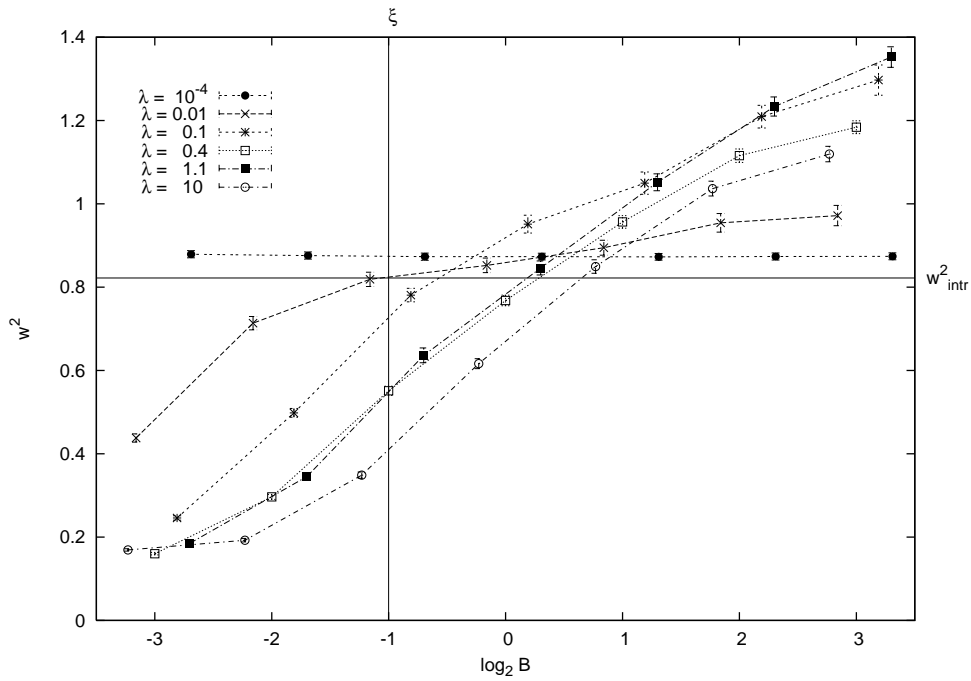


Abbildung 8.10: Gradient-Dicken für $10^{-4} \leq \lambda \leq 10$ und der Gittergröße $L = 64$.

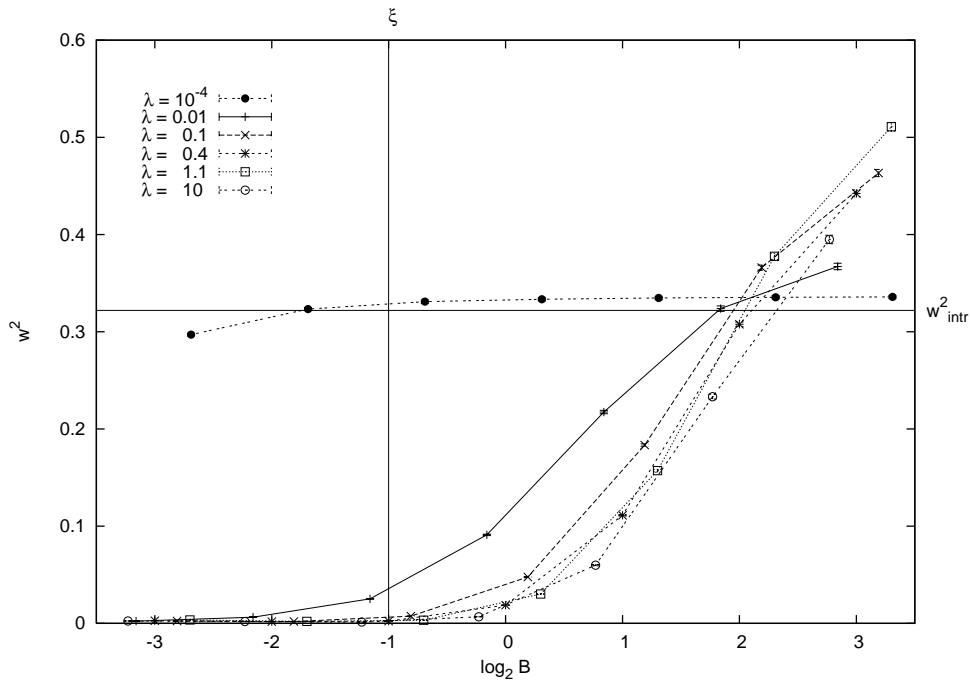


Abbildung 8.11: Gradient-Dicken für $10^{-4} \leq \lambda \leq 10$ und der Gittergröße $L = 64$.

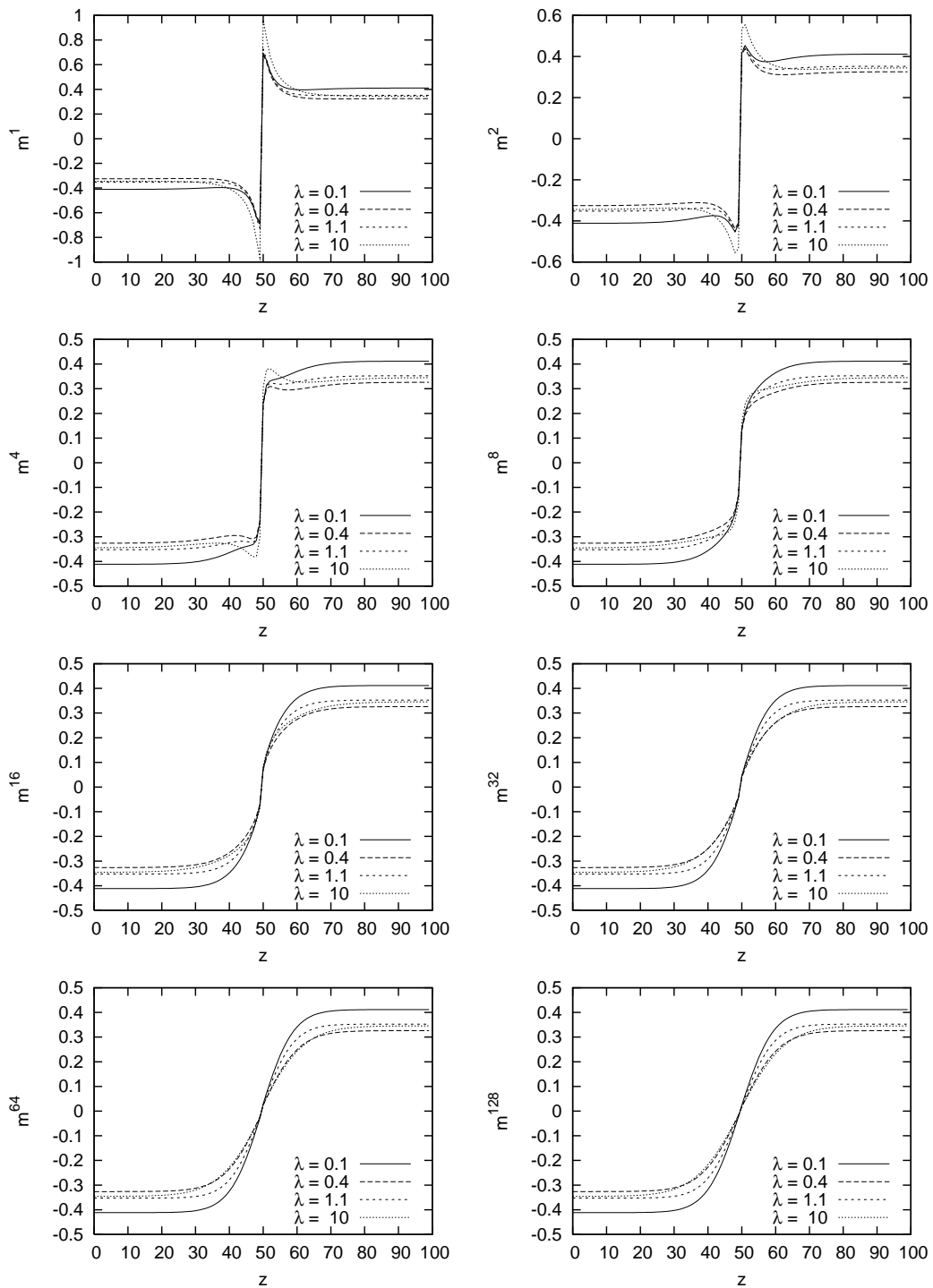
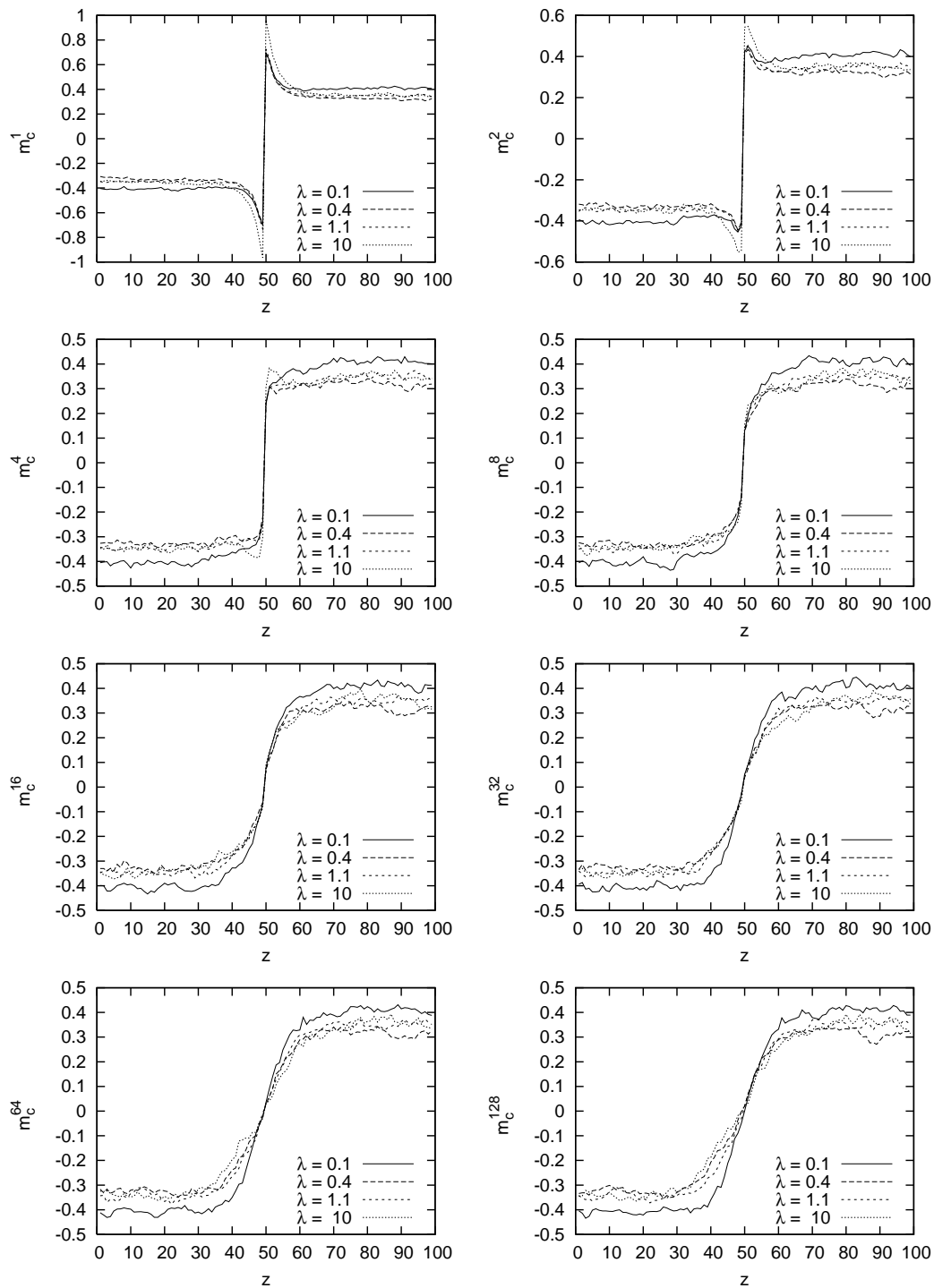


Abbildung 8.12: Lokale Grenzflächenprofile der Simulationen $L = 128$.

Abbildung 8.13: Lokale Grenzflächenprofile einer Konfiguration der Größe $L = 128$.

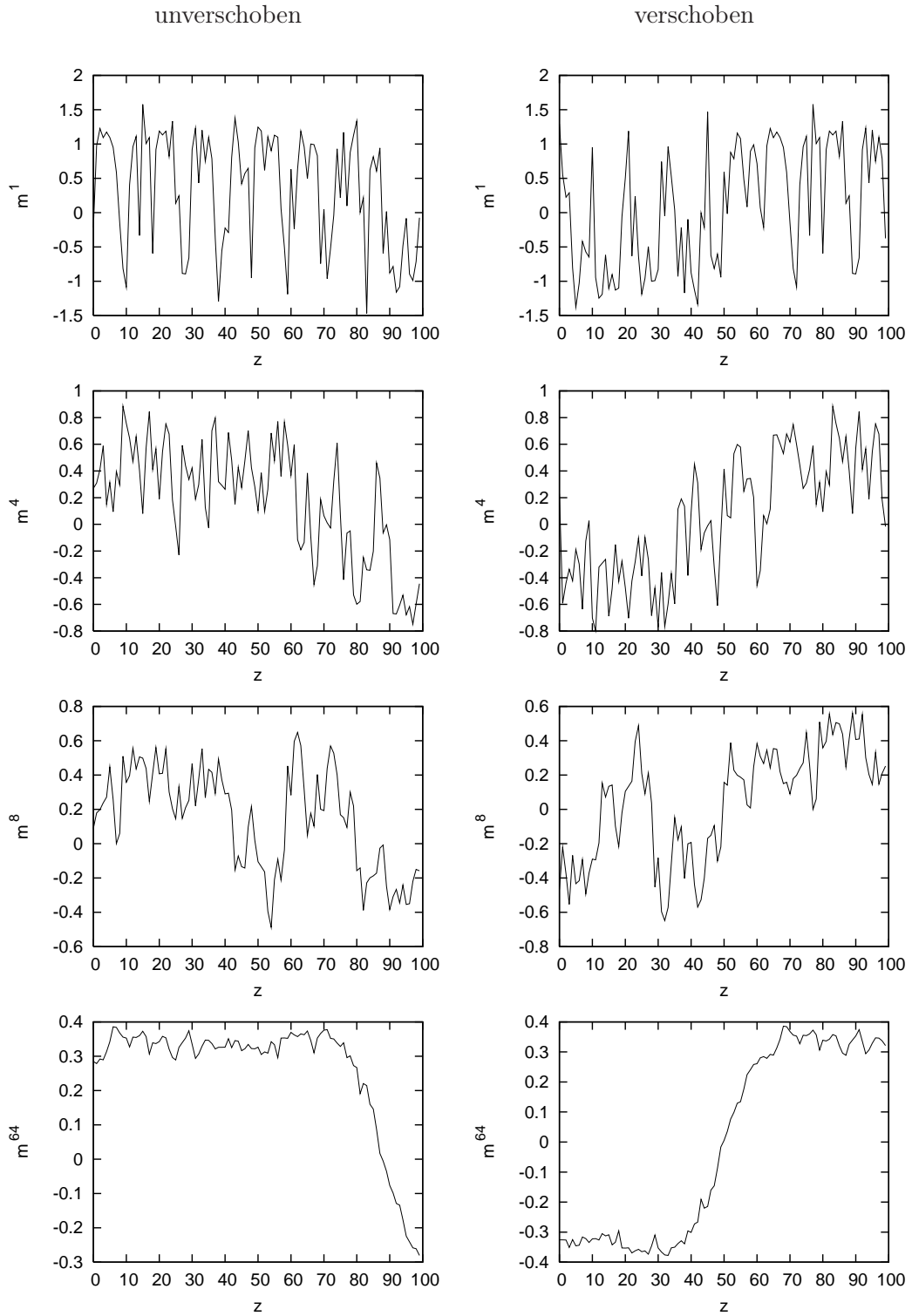


Abbildung 8.14: Lokales Grenzflächenprofil eines einzelnen Blocks in der Simulation

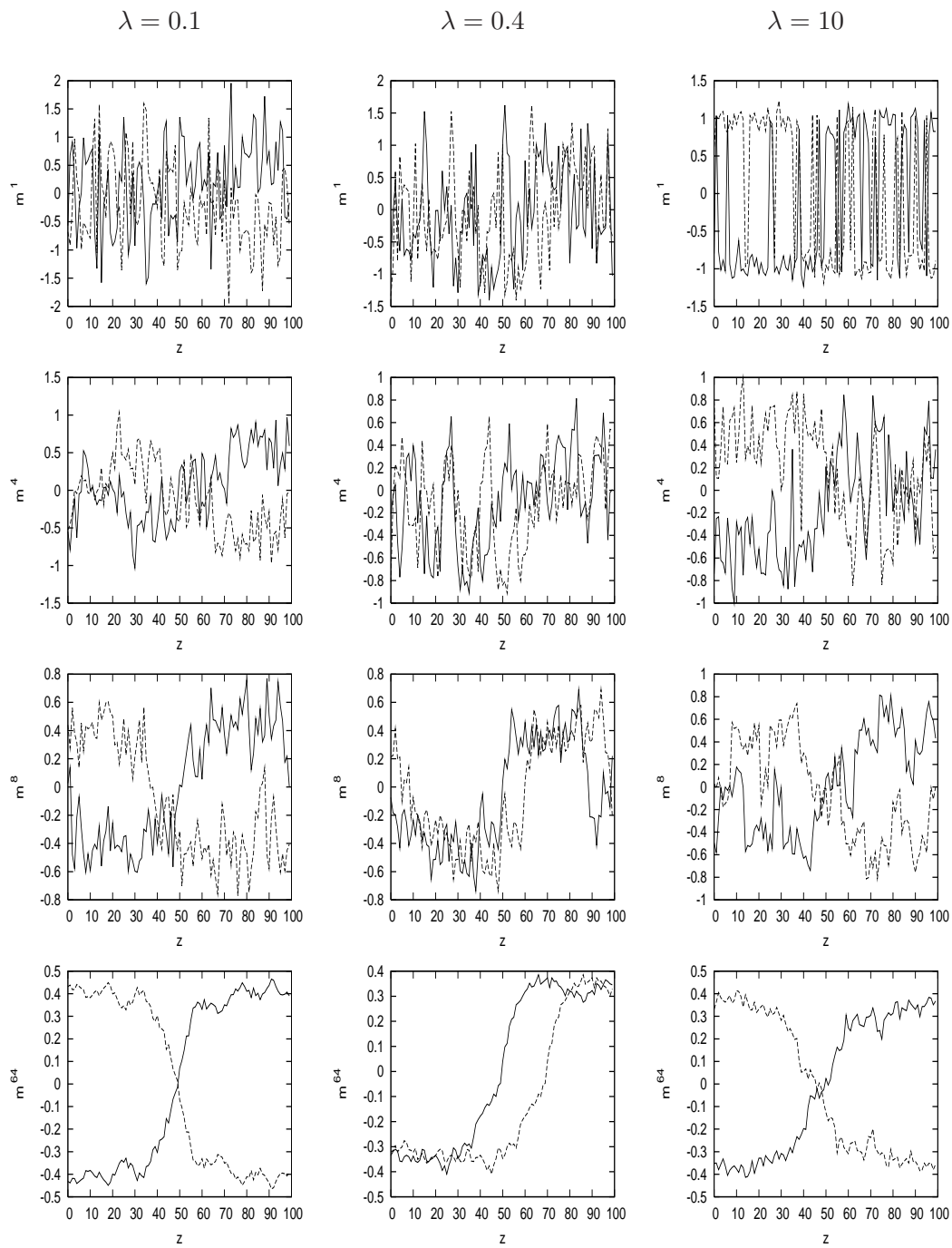


Abbildung 8.15: Lokales Grenzflächenprofil eines einzelnen Blocks vor und nach dem Randschiebverfahren in den Simulationen $L = 128$.

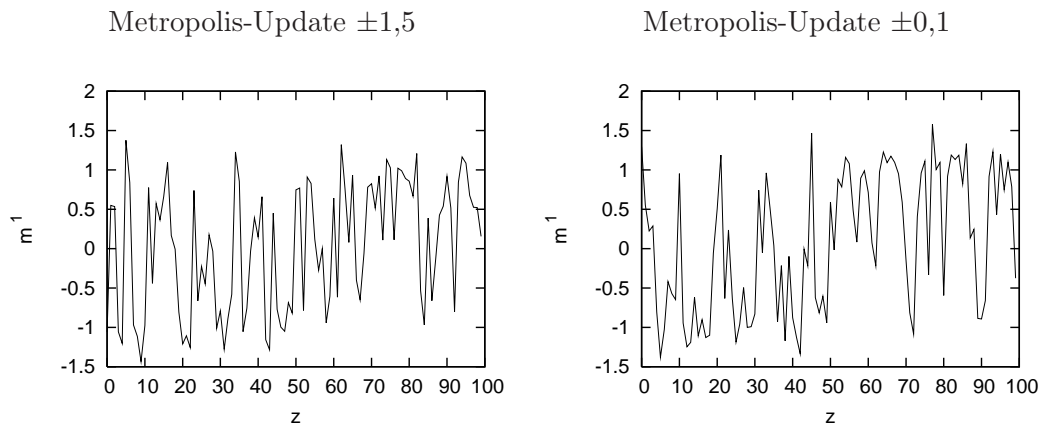


Abbildung 8.16: Verschobene lokale Grenzflächenprofile eines einzelnen Blocks für $\lambda = 1.1$ und unterschiedlichen Metropolis-Amplituden.

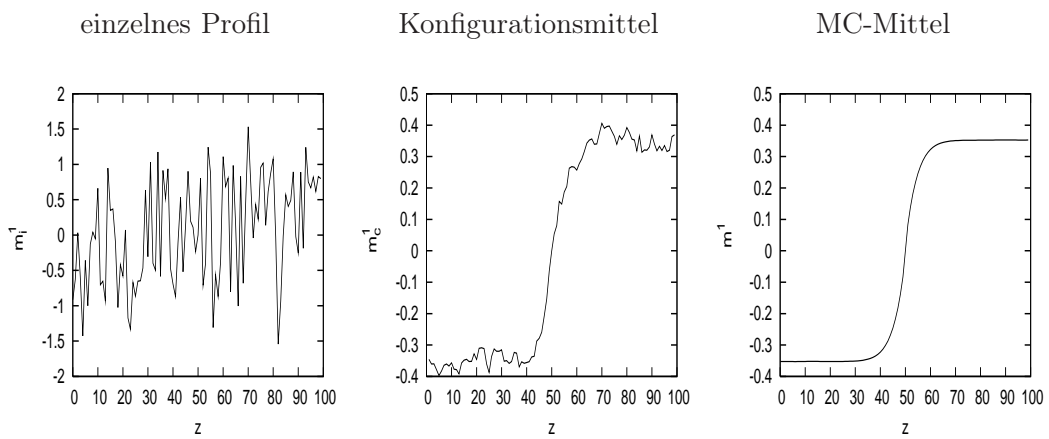


Abbildung 8.17: Lokale Magnetisierungsprofile für $\lambda = 1.1$ mit fixierter Grenzfläche.

9 Zusammenfassung und Ausblick

Nahe der kritischen Temperatur können Grenzflächen durch die Landau- und Kapillarwellen-Theorie auf zwei verschiedenen Größenordnungen beschrieben werden. Der Übergang zwischen dem intrinsischen und makroskopischen Regime findet in der Größenordnung der Korrelationslänge statt. Außerhalb dieser Modelle ist die Unterscheidung zwischen diesen Regimen zunächst unklar. In einer Ising-Simulation können die Fluktuationen mittels eines Blocking-Verfahrens getrennt werden und es lassen sich die Aussagen der Kapillarwellen-Theorie bestätigen, die intrinsische Grenzfläche bleibt aber weiterhin verborgen.

In dieser Arbeit wurde deshalb die ϕ^4 -Theorie selbst auf einem Gitter simuliert. Indem die Parameter der Simulation schrittweise vom Ising-Limes zum Freien Feld geändert wurden, konnte gezeigt werden, dass die Ising-Artefakte nur eine geringe Verantwortung für die Abweichung der berechneten intrinsischen Grenzflächendicke zur Theorie haben. Tatsächlich überlagern kritische Fluktuationen die Grenzflächenprofile kleiner Blockgrößen und verhindern, dass die Grenzflächenposition bestimmt werden kann. Die Monte-Carlo-Daten können nicht korrekt gemittelt werden und führen auf einen unphysikalischen Profilverlauf. Es ist mit den gewählten Methoden prinzipiell nicht möglich, durch Hoch- und Tiefpass-Filterung der Fluktuationen gleichzeitig die beiden unterschiedlichen Regime sichtbar zu machen.

Aus diesem Grund wurde die Grenzflächenposition in einer zweiten Simulation fixiert. Dadurch zeigt die Grenzflächendicke natürlich keine Verbreiterung mit der Systemgröße durch den Einfluss der Kapillarwellen, aber es konnte nun die intrinsische Dicke bestimmt werden. Für die Definition über das zweite Moment des Gradienten zeigt sich bei der Parameterwahl $\lambda = 0,4$ und $\lambda = 1,1$ eine gute Übereinstimmung mit den theoretischen Vorhersagen. Bei den über das Quadrat des Gradienten berechneten Dicken kam es zu Abweichungen, die sich vermutlich drauf zurückführen lassen, dass diese Definition numerisch weniger robust ist.

Somit ist die numerische Situation nicht unähnlich zur Theorie: Es ist gelungen, die intrinsische und die makroskopische Größenordnung einzeln sichtbar zu machen und deren Aussagen zu bestätigen, aber es war nicht möglich, innerhalb einer Simulation den Übergang zwischen diesen Regimen zu beobachten. Dies zu zeigen ist auch weiterhin eine interessante Aufgabe. Hierzu müsste eine Methode gefunden werden, die Grenzflächenposition auch bei sehr starken Fluktuationen zuverlässig zu bestimmen.

Literaturverzeichnis

- [BDFN92] J. J. Binney, N. J. Dowrick, A. J. Fisher, and M. E. J. Newman, *The Theory of Critical Phenomena*, Oxford University Press, Oxford, 1992.
- [Ber04] B. A. Berg, *Markov Chain Monte Carlo Simulations and Their Statistical Analysis*, World Scientific, Singapore, 2004.
- [BLS65] F. P. Buff, R. A. Lovett, and F. H. Stillinger, *Interfacial density profile for fluids in the critical region*, Phys. Rev. Lett. **15** (1965), no. 15, 621–623.
- [BT89] R. C. Brower and P. Tamayo, *Embedded Dynamics for ϕ^4 Theory*, Phys. Rev. Lett. **62** (1989), 1087–1090.
- [CHP99] M. Caselle, M. Hasenbusch, and P. Provero, *Non-perturbative states in the 3D ϕ^4 theory*, Nucl. Phys. **B556** (1999), 575–600.
- [Gol92] N. Goldenfeld, *Lectures on phase transitions and the renormalization group*, Frontiers in physics, Addison-Wesley, 1992.
- [Has99] M. Hasenbusch, *A Monte Carlo study of leading order scaling corrections of ϕ^4 theory on a three dimensional lattice*, J. Phys. **A32** (1999), 4851–4865.
- [Köp08] M. Köpf, *Rauhigkeit von Grenzflächen in der Ising-Universalitätsklasse*, Diplomarbeit, Westfälische Wilhelms-Universität Münster, Januar 2008.
- [Küs01] J. Küster, *Kritisches Verhalten fluktuierender Grenzflächen*, Dissertation, Westfälische Wilhelms-Universität Münster, 2001.
- [LB91] M. Le Bellac, *Quantum and Statistical Field Theory*, Oxford University Press, 1991.
- [LBMB04] M. Le Bellac, F. Mortessagne, and G. G. Batrouni, *Equilibrium and Non-Equilibrium Statistical Thermodynamics*, Cambridge University Press, Cambridge, 2004.
- [LL66] L. D. Landau and E. M. Lifschitz, *Statistische Physik*, Lehrbuch der theoretischen Physik, no. 5, Akademie-Verlag, Berlin, 1966.

- [LLM88] M. Litzkow, M. Livny, and M. Mutka, *Condor - a hunter of idle workstations*, Proceedings of the 8th International Conference of Distributed Computing Systems, June 1988.
- [MM94] I. Montvay and G. Münster, *Quantum fields on a lattice (cambridge monographs on mathematical physics)*, Cambridge University Press, Cambridge, 1994.
- [MM05] M. Müller and G. Münster, *Profile and Width of Rough Interfaces*, J. Statist. Phys. **118** (2005), 669.
- [MRR⁺53] N. Metropolis, A. W. Rosenbluth, M. N. Rosenbluth, A. H. Teller, and E. Teller, *Equation of state calculations by fast computing machines*, J. Chem. Phys. **21** (1953), 1087–1092.
- [Mül04] M. Müller, *Fluktuationen kritischer Grenzflächen auf verschiedenen Größenskalen*, Diplomarbeit, Westfälische Wilhelms-Universität Münster, Januar 2004.
- [NB99] M. E. J. Newman and G. T. Barkema, *Monte Carlo Methods in Statistical Physics*, Oxford University Press, Oxford, 1999.
- [Saf94] S. A. Safran, *Statistical Thermodynamics of Surfaces, Interfaces, and Membranes*, Addison-Wesley, 1994.
- [Sch06] D. A. Schaich, *Lattice Simulations of Nonperturbative Quantum Field Theories*, Bachelor Thesis, Amherst College, Mai 2006.
- [Wol89] U. Wolff, *Collective Monte Carlo Updating for Spin Systems*, Phys. Rev. Lett. **62** (1989), no. 4, 361–364.
- [Wol04] ———, *Monte Carlo errors with less errors*, Comput. Phys. Commun. **156** (2004), 143–153.

Danksagung

An dieser Stelle möchte ich mich bei allen bedanken, die zum Entstehen dieser Diplomarbeit beigetragen haben.

Herrn Professor Gernot Münster danke ich für die freundliche Betreuung und das interessante Thema, das seine Spannung bis in die letzten Stunden beibehielt.

Außerdem danke ich Melanie Müller für ihre Hilfe während der Einarbeitung und ihr zur Verfügung gestelltes Programm, das in Teilen als Vorlage diente.

Meinen Freunden im Studium und insbesondere meinen Mitbewohnern im Raum 411 Peter Düben und Martin Wilde danke ich für den gemeinsamen Spaß.

Thomas Papenkort danke ich für die vielen aufschlussreichen Diskussionen und das Korrekturlesen der Arbeit.

Mein ganz besonderer Dank gilt meinen Eltern für ihre uneingeschränkte Unterstützung während meines Studiums.

Ich danke außerdem meiner Übungsgruppe für ihre Begeisterungsfähigkeit und die gemeinsam erklommenen Gipfel der Backkunst: Verena Paszkiet, Ramona Wohlleb, Florian Jäger, Tobias Lahme, Markus Lange, Artem Nepechiy und Jan Wulf.

Selbständigkeitserklärung

Hiermit erkläre ich, dass ich die Diplomarbeit selbständig verfasst habe und keine anderen als die angegebenen Quellen und Hilfsmittel verwendet habe.

Münster, den 7. Januar 2009